

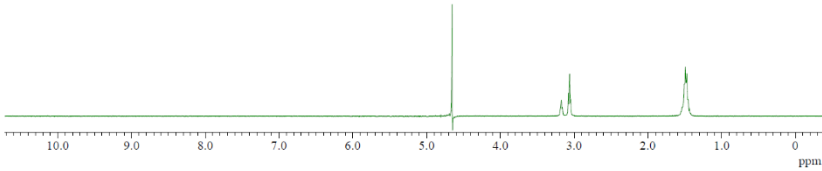
Saturation Transfer Difference (STD) 测试方法

Saturation Transfer Difference (STD) 谱是测定蛋白质和小分子活性化合物相互作用的一种非常有用的方法。通过不停照射蛋白质的峰使蛋白质信号饱和，由于活性小分子会和蛋白质结合，使蛋白质的磁化状态也能转移到有相互作用的小分子上，使小分子信号也被饱和。而其它和蛋白质没有相互作用的小分子则保持原来状态。STD 谱可以清楚地识别结合活性化合物，主要用来筛选活性小分子。

样品: albumin, L-(+)-arginine and L-tryptophan

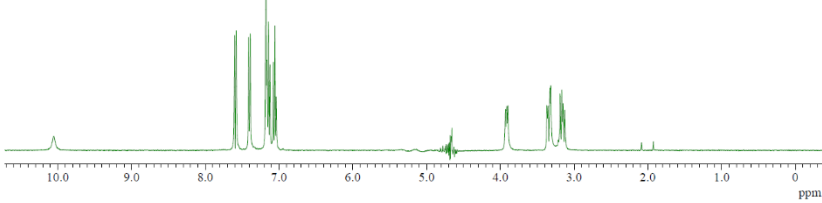
20121129_L-(+)-Arginine_wgh_dpfqse-1-2.jdf

L-(+)-arginine



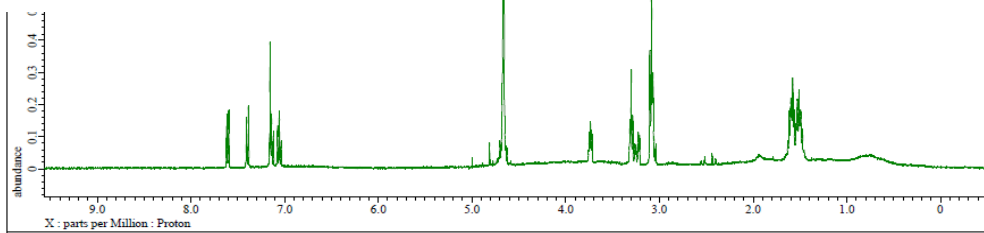
20121129 L-Tryptophan H2O wah defase-1-2.jdf

L-tryptophan



Albumin+Arginine+Tryptophan_Proton_STD-3-6.jdf

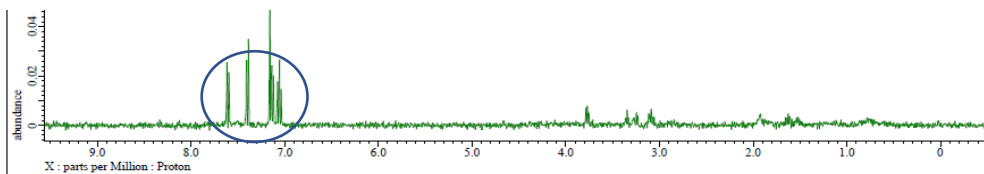
albumin, L-(+)-arginine and L-tryptophan



20121130_Albumin+Arginine+Tryptophan_STD_wgh_512scans-1-4.jdf

STD 谱

L-tryptophan 和 Albumin 有活性

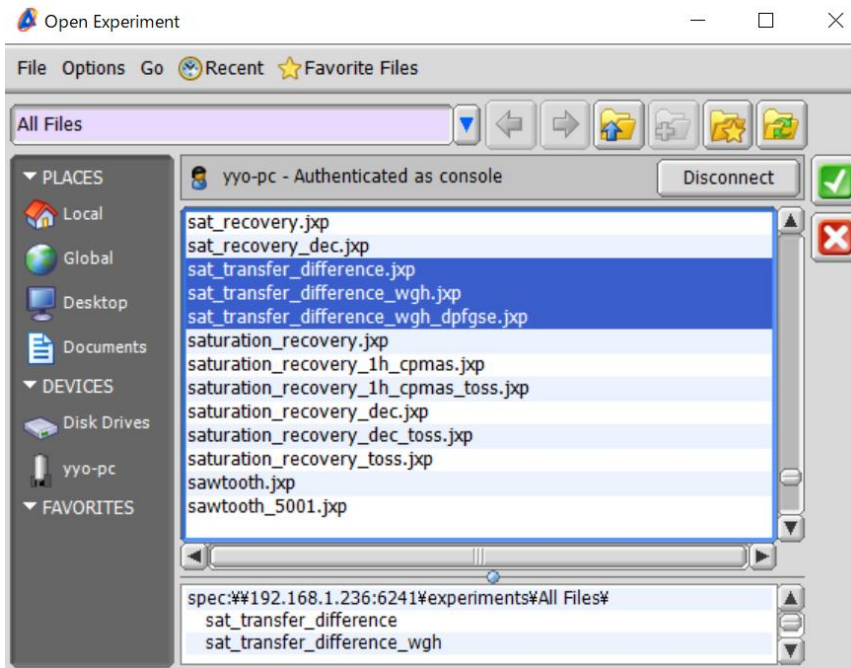


STD 测试方法

选择脉冲:

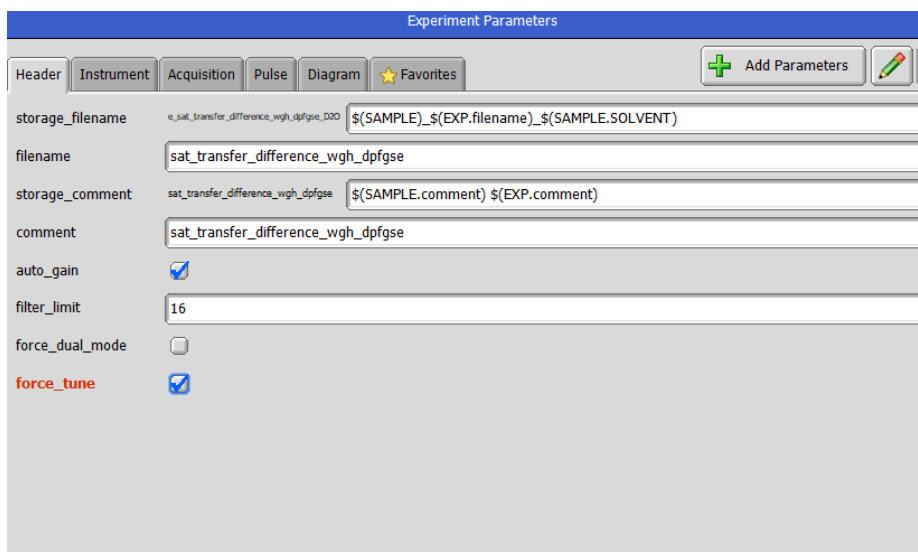
不含水或水峰低的样品选择 sat_transfer_difference.jxp.

含水高的样品选择 sat_transfer_difference_wgh_dpfge.jxp



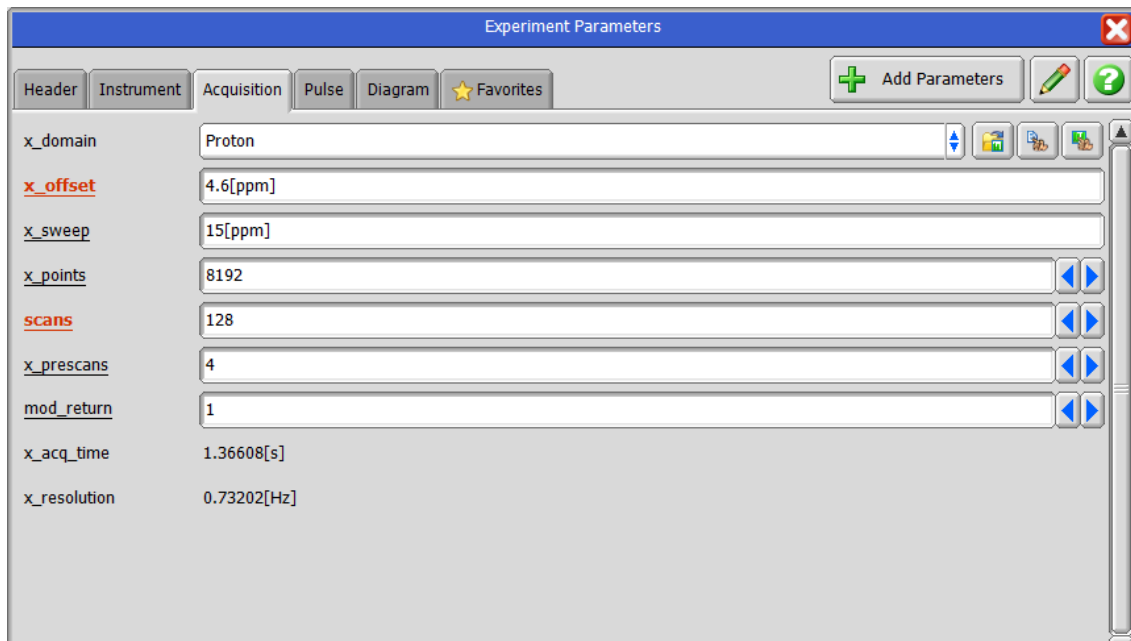
以 sat_transfer_difference_wgh_dpfge.jxp 为例进行参数设定。

勾选上 force tune



使用 sat_transfer_difference_wgh_dpfqse.jxp 脉冲时, x offset 选择水峰位置。(水峰位置由氢谱上读取)

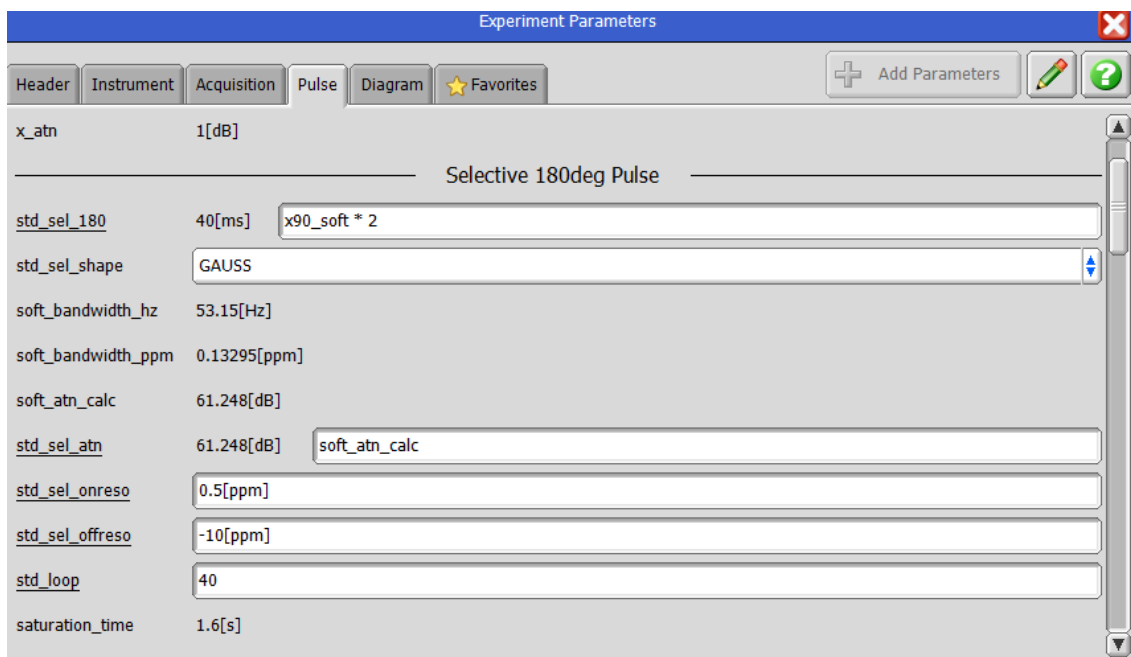
使用 sat_transfer_difference.jxp 脉冲时, x offset 选择默认值 5[ppm].



Std_sel_onreso: 蛋白质峰的位置

Std_sel_offreso: 不含蛋白质峰的位置, 一般用默认

Std_loop: 照射次数,影响 Saturation_time。Saturation_time 一般在 0.1s-4s 之间。



t1pfilter: 消除蛋白质的峰，时间越长蛋白质的峰越小，小分子的信号峰也会稍微变小。

relaxation_delay: 使 repetition time 为小分子 T1 时间的 5 倍。

The screenshot shows the 'Experiment Parameters' window with the following parameters and values:

- saturation_time: 1.6[s]
- Relaxation_Filter
- t1pfilter: 0.1[s]
- t1pfilter_atn: 10.897[dB] (xatn_spin)
- DPFGSE Watergate hard solvent suppression
- watergate_selection: W5
- wgh_x_pulse: 8[us] (x90)
- wgh_null_default: 3.19826[kHz]
- wgh_null: 3.19826[kHz] (wgh_null_default)
- wgh_null_ppm: 8[ppm]
- wgh_tau: 0.31267[ms]
- wgh_grad_1: 1[ms]
- wgh_grad_1_amp: 0.102[T/m]
- wgh_grad_2: 1[ms] (wgh_grad_1)
- wgh_grad_2_amp: 66.0[mT/m]
- wgh_grad_shape: SQUARE
- wgh_grad_recover: 0.1[ms]
- Pulse Delay
- relaxation_delay: 5[s]
- repetition_time: 7.96608[s]
- lock hold