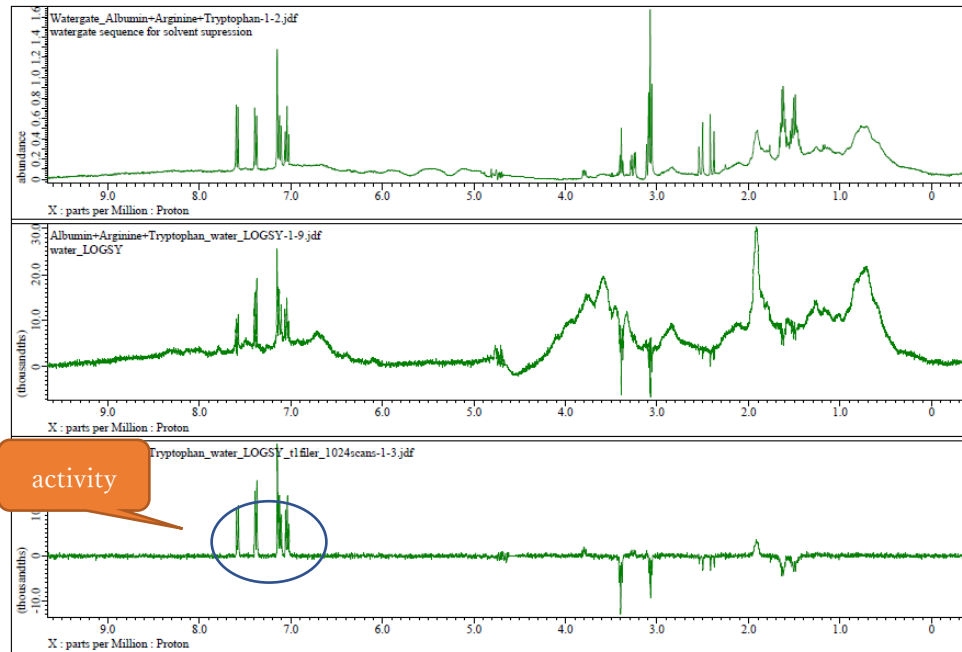


WaterLOGSY 测试方法

WaterLOGSY (Water-Ligand Observed via Gradient Spectroscopy) 是筛选与蛋白质有相互作用的小分子化合物的一种非常有效的方法。本实验的原理是通过检测从水分子转移到小分子化合物的 NOE 信号的来确定是否和蛋白质有亲和性。在体系中有好几种 NOE 的磁化转移路径, 从水到小分子化合物的主要路径取决于蛋白质-配体的相互作用, 根据转移路径不同将导致正或负的 NOE 效应。由于这种作用可以很容易地识别蛋白质亲和力化合物。最近, 我们在 JEOL 400MHz 系统上演示了 WaterLOGSY 实验。在本实验中, 和蛋白质结合的小分子化合物的显示正信号, 而非结合小分子化合物显示负信号。

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

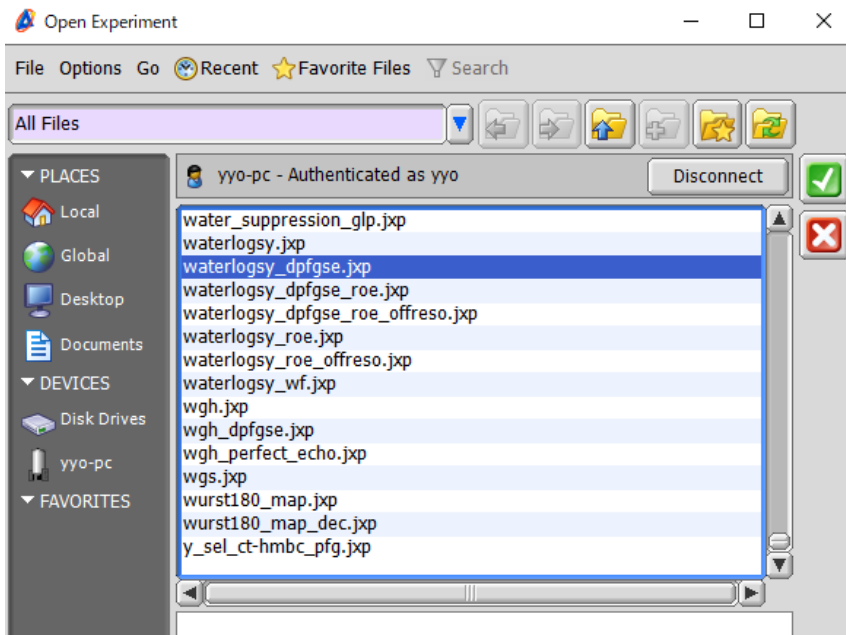
^1H
WaterLOGSY
WaterLOGSY
with T1p filter



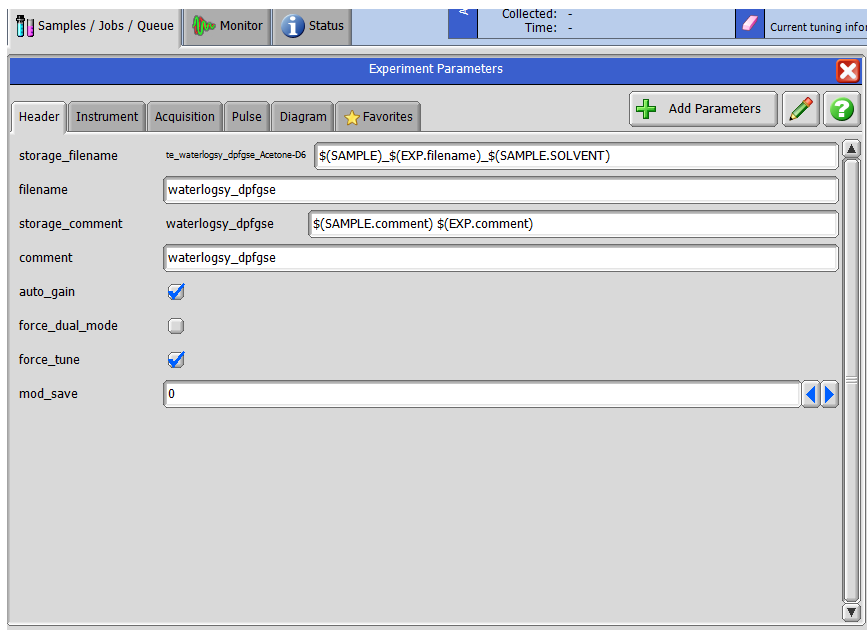
WaterLOGSY 测试方法

1, 选择脉冲

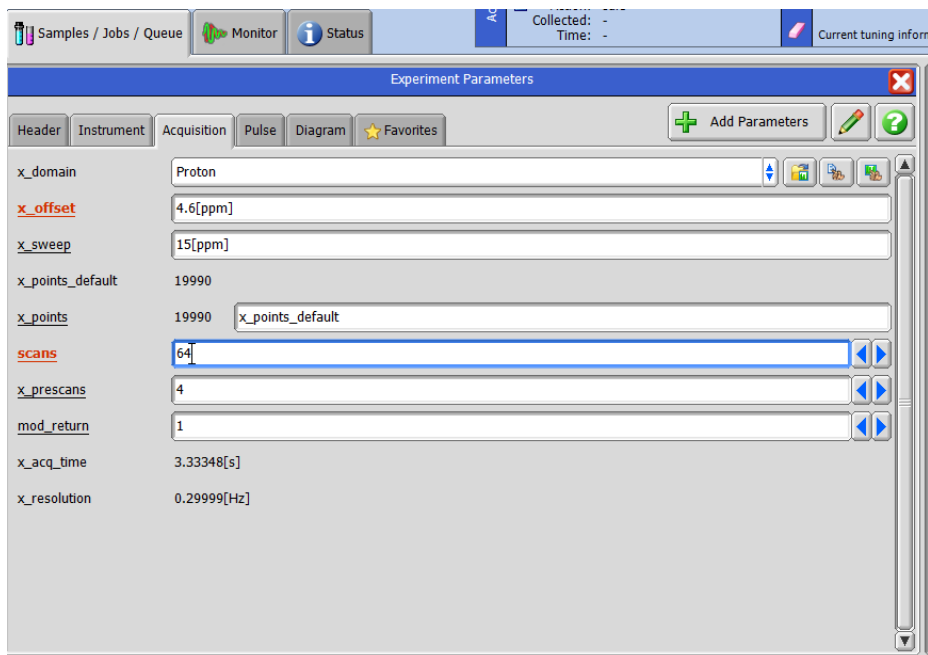
一般选择 waterlogsy_dpgfse.jsp



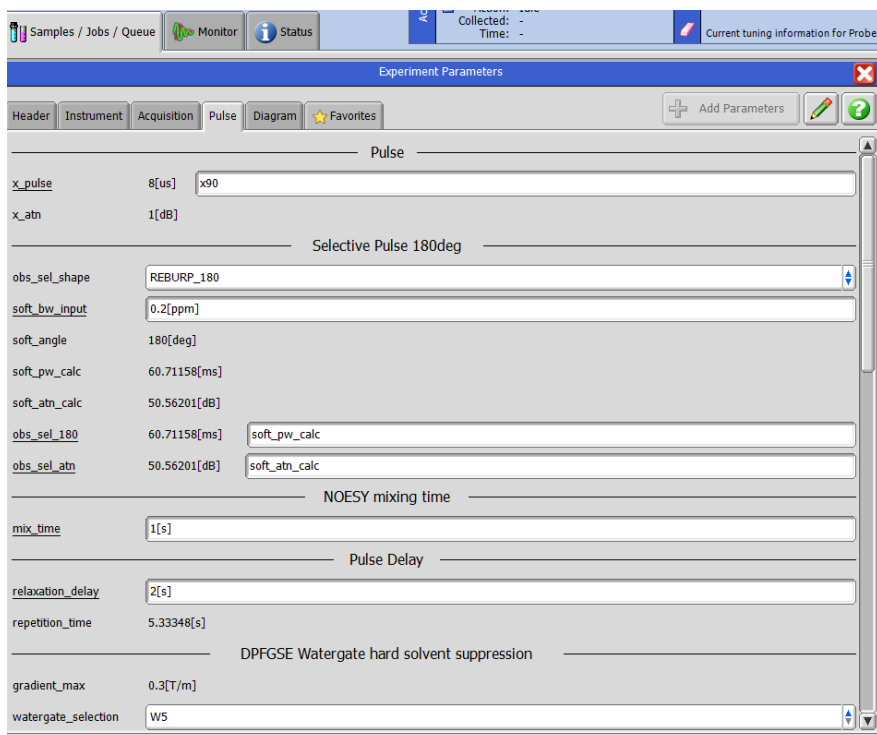
勾选上 force tune, auto_gain



x offset 选择水峰位置。(水峰位置由氢谱上读取), Scans 建议改成 64 或者 128。



mix_time 和 relaxation_delay 可以用默认的。



t1pfilter: 消除蛋白质的峰。

t1pfilter_time 时间越长蛋白质的峰越小，小分子的信号峰也会变小。

The image shows a software control panel with two main sections: "Pulse Field Gradient" and "Relaxation_Filter".

Pulse Field Gradient Section:

- grad_1: 1[ms]
- grad_1_amp: 40.0[mT/m]
- grad_2: 1[ms] (linked to grad_1)
- grad_2_amp: -20.0[mT/m] (linked to grad_1_amp * -0.5)
- grad_1zz_amp: 5.0[mT/m]
- grad_shape: SINE
- grad_recover: 0.1[ms]

Relaxation_Filter Section:

- relaxation_filter: T1p Filter
- delay_list: 40[ms]
- tau_step: 0.1[ms]
- tau_interval_t2: 42.0[us]
- loop_number: 400
- t1pfilter_time: 40[ms]
- t1pfilter_atn: 10.897[dB] (linked to xatn_spin)

lock hold Section:

- lock_hold:

Bottom Status Bar:

- Receiver Gain: 50
- Spin: 0[Hz]
- Lock: 3019
- Temp: 24.8[dC]
- Helium: 50%