Пространственное строение дипептида γGlu–Trp, определенное путем анализа величин остаточного диполь-дипольного взаимодействия

Аннотация

В исследовании трехмерной структуры дипептида γGlu–Trp использован подход, основанный на анализе величины остаточного диполь-дипольного взаимодействия между ядрами 1H и 13C в молекулах, частично ориентированных в лиотропной жидкокристаллической среде. Определено пространственное строение дипептида.

Ключевые слова: спектроскопия ЯМР 1H и 13C, остаточное диполь-дипольное взаимодействие, пространственная структура, молекулярная динамика, дипептид.

Summary

An approach based on analysis of the residual 1H and 13C dipolar couplings in molecules partially aligned in a lyotropic liquid crystalline medium was used to study three-dimensional structure of dipeptide γGlu–Trp. Spatial structure of the dipeptide was determined.

Key words: 1H and 13C NMR spectroscopy, residual dipolar coupling, spatial structure, molecular dynamics, dipeptide.

Литература


Ефимов Сергей Владимирович – аспирант кафедры общей физики Казанского (Приволжского) федерального университета.
E-mail: Sergej.Efimov@ksu.ru

Юльметов Айдар Рафаилович – кандидат физико-математических наук, ассистент кафедры общей физики Казанского (Приволжского) федерального университета.

Клочков Антон Владимирович – кандидат физико-математических наук, ведущий инженер кафедры молекулярной физики Казанского (Приволжского) федерального университета.

Азиатская Гузель Анваровна – студент кафедры биохимии Казанского государственного медицинского университета.

Мухамадиев Фархат Рифатович – лаборант кафедры биохимии Казанского государственного медицинского университета.

Байкеев Рустем Фрунзевич – доктор медицинских наук, профессор кафедры биохимии Казанского государственного медицинского университета.

Клочков Владимир Васильевич – доктор химических наук, профессор кафедры общей физики Казанского (Приволжского) федерального университета.
E-mail: Vladimir.Klochkov@ksu.ru