

Veränderung der chemischen Verschiebung

C.1 Beziehung zwischen der Veränderung der chemischen Verschiebung (CSP) und der Affinität

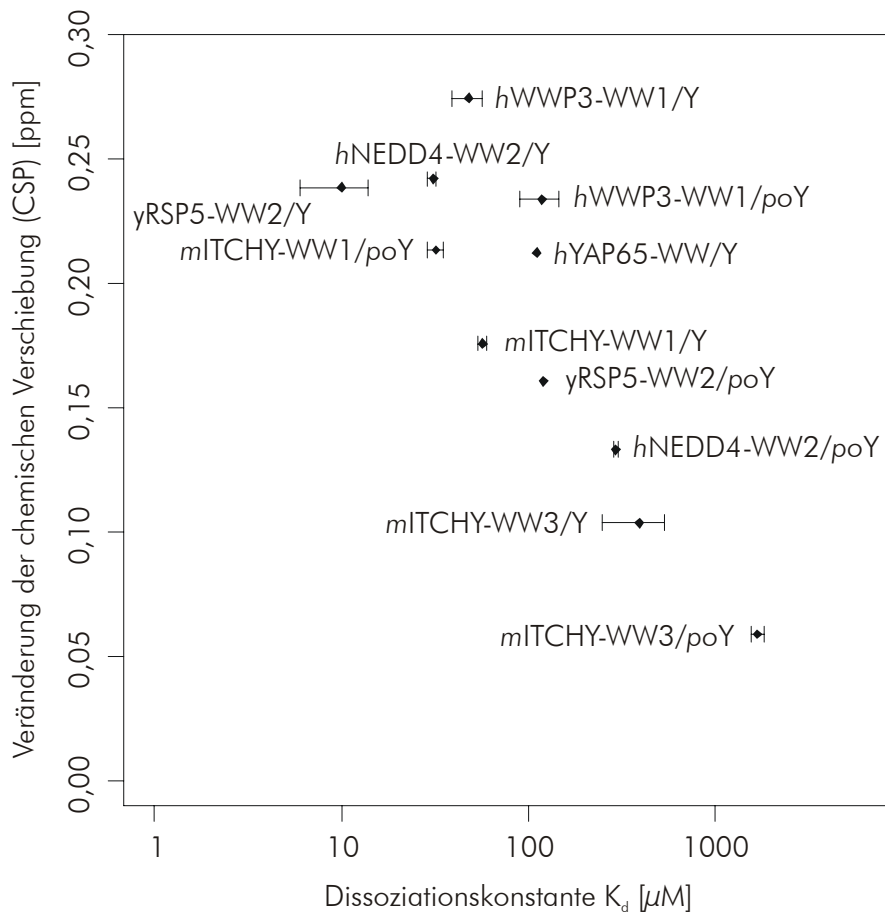


Abbildung C-1 Beziehung zwischen der Veränderung der chemischen Verschiebung (CSP) und der Affinität

Die Veränderungen der chemischen Verschiebungen (CSP) sind gegen die Dissoziationskonstanten (K_d) für exemplarische WW-Domänen im Komplex mit dem Y- bzw. poY-Modellliganden aufgetragen. Die dargestellten WW-Domänen repräsentieren dabei das Spektrum der CSPs, welche für das Training der CoMFA- und COMBINE-Modelle verwendet wurden. Als CSP wurde die Veränderung der chemischen Verschiebung des Wasserstoffatoms am Indolstickstoff von W ω 39 der WW-Domänen in 1D- ^1H -NMR-Spektren in Folge der Bindung des Liganden quantifiziert (siehe 2.3.1.2). Die Dissoziationskonstanten wurden durch UV-Fluoreszenzspektroskopie bestimmt (siehe 2.4.1). Der Korrelationskoeffizient zwischen den CSPs und den logarithmustransformierten $\ln(K_d)$ -Werten beträgt $r = -0,85$. In dem betrachteten CSP-Bereich ist die Korrelation zwischen den logarithmustransformierten $\ln(\text{CSP})$ -Werten und den logarithmustransformierten $\ln(K_d)$ -Werten ebenfalls sehr gut ($r = -0,88$).