

Mathematisch-Naturwissenschaftliche Fakultät

Institut für Biowissenschaften / Chemie / Mathematik / Physik

Fachgebiet: *Chemie*

Betreuer: Prof. Dr.-ing. Björn Corzilius

Ihr Name: Thomas Biedenbänder

(e-mail: thomas.biedenbaender@uni-rostock.de)

Methods development for site-specific investigation of biomolecular structure and dynamics with DNP-enhanced solid-state NMR

Deutsche Zusammenfassung

In dieser Arbeit werden Entwicklungen im Bereich der dynamischen Kernpolarisationstechniken vorgestellt, einschließlich eines matrixfreien Probenvorbereitungsansatzes, Experimente, die einen durch heteronukleare Kreuzrelaxation induzierten Transfer verwenden und Messungen von Relaxationszeitkonstanten. Diese drei Ansätze erleichtern ortsspezifische Untersuchungen von komplexen biomolekularen Systemen. Unter anderem wird die Integration der heteronuklearen Kreuzrelaxation über SCREAM-DNP mit der dipolaren Rekopplung erforscht. Die matrixfreie DNP-Methode wird anhand von Modellproteinen optimiert und auf medizinisch relevante Proben, wie z. B. Amyloid- β -filternde Cellulose, angewendet. Abschließend zeigt die Verwendung von DNP für Messungen von Relaxationszeitkonstanten ein erhebliches Potenzial auf, weist aber auch auf Herausforderungen wie paramagnetische Effekte und Matrixwechselwirkungen hin. Zukünftige Bemühungen werden sich auf die Verfeinerung dieser Techniken für gezielte Studien biomolekularer Strukturen und Dynamik konzentrieren.

Englische Zusammenfassung

This work presents developments in Dynamic Nuclear Polarization techniques, including a matrix-free sample preparation approach, experiments utilizing a heteronuclear cross relaxation-induced transfer, and measurements of relaxation time constants. These three approaches facilitate site-specific investigations of complex biomolecular systems. Specifically, the integration of heteronuclear cross-relaxation via SCREAM-DNP with dipolar recoupling is explored. The matrix-free DNP method is optimized using model proteins and applied to medically relevant samples, such as amyloid- β -filtering cellulose. Additionally, the use of DNP for relaxation time measurements reveals significant potential but also highlights challenges, including paramagnetic effects and matrix interactions. Future efforts will focus on refining these techniques for targeted studies of biomolecular structures and dynamics.