

# Mathematisch-Naturwissenschaftliche Fakultät

## Institut für Chemie

### Fachgebiet: Chemie

Betreuer: Prof. Dr. Björn Corzilius

---

**M. Sc. Victoria Aladin**

(e-mail: victoria.aladin@uni-rostock.de )

### *Development and Application of Solid State Nuclear Magnetic Resonance under Dynamic Nuclear Polarization for Investigation of Biomolecular Complexes*

Nuclear magnetic resonance (NMR) allows to obtain information about the molecular structure. However, NMR is limited by its intrinsic low sensitivity. By using dynamic nuclear polarization (DNP) the sensitivity of solid-state NMR can be enhanced. However, even with the DNP-enhanced NMR, the structural analysis of complex biomolecules is difficult. A new approach to treat this problem is the use of site-specific investigation methods. Here, only a part of a large biomolecule is examined. This can be implemented by using suitable “spy functions” which are introduced at a specific position in the biomolecule.

In this work, a new method for site-specific investigation in solid-state DNP called "Specific Cross-Relaxation Enhancement by Active Motions under DNP" (SCREAM-DNP) is presented and used to gain dynamical and structural information in different biomolecular systems. SCREAM-DNP allows to spectrally filter out the background resonances and is used as proof of binding between a ribonucleic acid and a ligand. Moreover, SCREAM-DNP is used for distance determination up to the subnanometer range.

Die magnetische Kernspinresonanz (NMR) erlaubt, Informationen über die Umgebung der Atome und somit die Molekularstruktur zu gewinnen. Häufig stößt NMR allerdings auf Grund der geringen Empfindlichkeit an ihre Grenzen. Durch die Methode der dynamischen Kernspinpolarisation (DNP) kann die Empfindlichkeit von Festkörper-NMR gesteigert werden. Doch auch mit DNP ist die gezielte Strukturanalyse von bestimmten Biomolekülen sehr schwierig. Ein Teil der aktuellen DNP-Forschung fokussiert sich deshalb auf ortsspezifische Strukturuntersuchungen. Dabei wird nur ein Teil des Biomoleküls untersucht, wie z.B. das aktive Zentrum. Die Umsetzung der ortsspezifischen Untersuchung kann durch den Einsatz von geeigneten „Spion-Gruppen“ erfolgen.

In dieser Arbeit wird eine neue Methode der Festkörper-Magnetresonanzspektroskopie zur ortsspezifischen Untersuchung namens „Specific Cross-Relaxation Enhancement by Active Motions under DNP“ (SCREAM-DNP) vorgestellt und dafür verwendet, dynamische und strukturelle Informationen in biomolekularen Komplexen zu gewinnen. Die Methode erlaubt es, Dynamiken bei kryogenen Temperaturen zu identifizieren, den spektralen Hintergrund auszufiltern und die Bindung zwischen einer Ribonukleinsäure und einem Liganden nachzuweisen. Weiterhin wird gezeigt, dass SCREAM-DNP für distanzabhängige Untersuchungen verwendet werden kann.