

## Kurzzusammenfassung

Bei der Verwendung von Sättigungs-Transfer-Differenz-(STD)-Experimenten zur Untersuchung von Protein-Ligand-Wechselwirkungen stellt die Relaxation des Liganden einen der Hauptfaktoren für den experimentell beobachteten STD-Effekt dar. Dieser Einfluss erzeugt große Schwierigkeiten in der Interpretation der Daten und die Definition der *group epitope maps* (GEM). In dieser Arbeit wird eine Näherung aus der Relaxationsmatrix beschrieben, die eine vereinfachte Formel ergibt, über die direkt die Magnetisierungstransferrate vom Protein auf den Liganden berechnet werden kann. In dieser Methode, „*group epitope mapping considering relaxation of the ligand*“ (GEM-CRL) genannt, wird die Relaxation des Liganden mitberücksichtigt, in dem die experimentell bestimmten longitudinalen Relaxationszeiten verwendet werden.

Neben der Analyse von STD-Spektren wurden Anwendungen dieser Experimente auf zwei Protein-Ligand-Systeme gezeigt. In der ersten Anwendung wurde ein biologisch funktionell wichtiger Unterschied in der Bindungskinetik der Zucker Trehalose und Trehalose-6-phosphat an den Repressor TreR aus *E. coli* anhand von STD-Untersuchungen bestimmt. In einem weiteren Projekt wurde durch STD-Experimente nach Inhibitoren für CK2 gesucht, einer wichtigen Proteinkinase, die maligne Lymphome verursacht. Es konnten dabei vielversprechende Leitstrukturen gefunden werden, unter denen sich auch Metabolite wie z. B. Serotonin befinden.

Der zweite Teil dieser Arbeit befasste sich mit der NMR-Untersuchung des chiralen Co(III)-DACH-Salen-Katalysators für die hydrolytische kinetische Racematspaltung (HKR). Durch den Übergang des Komplexes zwischen einem paramagnetischen, pentavalenten und einem diamagnetischen, oktaedrischen Zustand konnte der stereoselektive Schritt bestimmt werden. Zusammen mit quantenmechanischen Berechnungen wurde die paramagnetische Verschiebung des *high spin*-Komplexes verwendet um die Konformation des Salenliganden in diesem Zustand zu bestimmen und einen Mechanismus für den enantioselektiven Schritt zu ermitteln.