

## Kurzzusammenfassung

In dieser Arbeit wurde der Einfluss von drei Natriumsalzen auf die Struktur von drei Prolin-basierten Peptid-Modellsystemen in wässriger Lösung durch eine Kombination von NMR-Spektroskopie und Molekulardynamik-Simulation untersucht. Die Natriumsalze decken einen weiten Bereich der Hofmeister-Serie ab, und die Wahl der Peptid-Modellsysteme stellt eine systematische Variation der Reste and N- und C-Terminus von Prolin dar.

Es wurde gezeigt, dass das *cis/trans*-Konformationsgleichgewicht, welches durch Rotation um die Prolin-Amid-Bindung gekennzeichnet ist, durch die Zugabe von Salzen beeinflusst werden kann, indem stets eine höhere Population des *cis*-Konformers erreicht wird. Der Einfluss hängt sowohl von der Identität des Anions als auch von der lokalen chemischen Struktur des Peptid-Modellsystems ab. Weiterhin wurde gezeigt, dass die beeinflussten Gleichgewichte in einigen Fällen nahezu unabhängig von Temperaturänderungen sind. Somit können Salze bestimmte Konformationen auch über große Temperaturbereiche von bis zu 80 °C fixieren. Die dies beschreibenden thermodynamischen Größen  $\Delta G$ ,  $\Delta H$  und  $\Delta S$  wurden für jeden Fall bestimmt.

Um diese Ergebnisse zu erklären, wurden Regionen der Peptid-Modellsysteme identifiziert, an die Ionen bevorzugt binden. Es wurde gezeigt, dass die *cis*-Konformere eine zusätzliche Bindungsstelle bereitstellen können, die durch die benachbarten Carbonylgruppen bestimmt ist, und die in der entsprechenden *trans*-Konformation nicht existiert. Dies kann die Stabilisierung der *cis*-Konformere erklären. Die bevorzugte Wechselwirkung der Anionen mit den *cis*-Konformeren konnte teilweise durch die elektrostatischen Oberflächenpotenziale der Peptid-Modellsysteme erklärt werden, welche sich für die verschiedenen Konformere unterscheiden. Die Informationen wurden durch die Bestimmung von Bindungsfrequenzen der Ionen mit den Modellsystemen ergänzt.