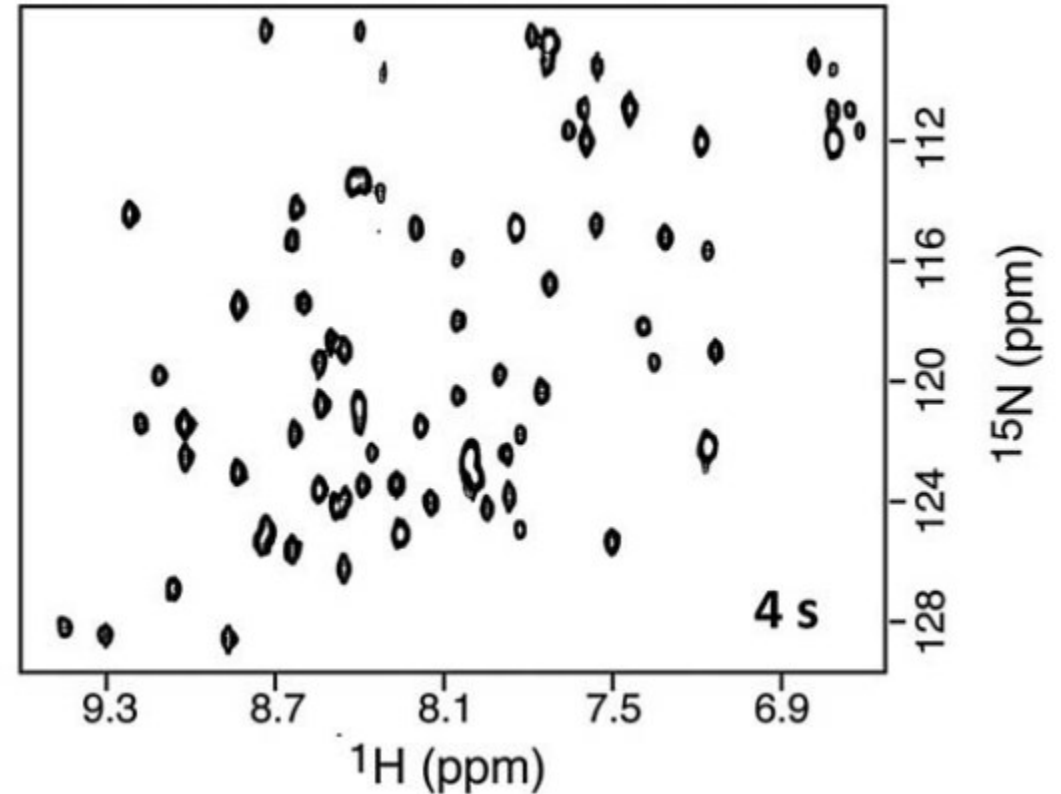


Optimierung von selektiven Pulsen mit skalierbaren Anregungswinkeln für Protein- NMR

Betreuerin: Stella Slad

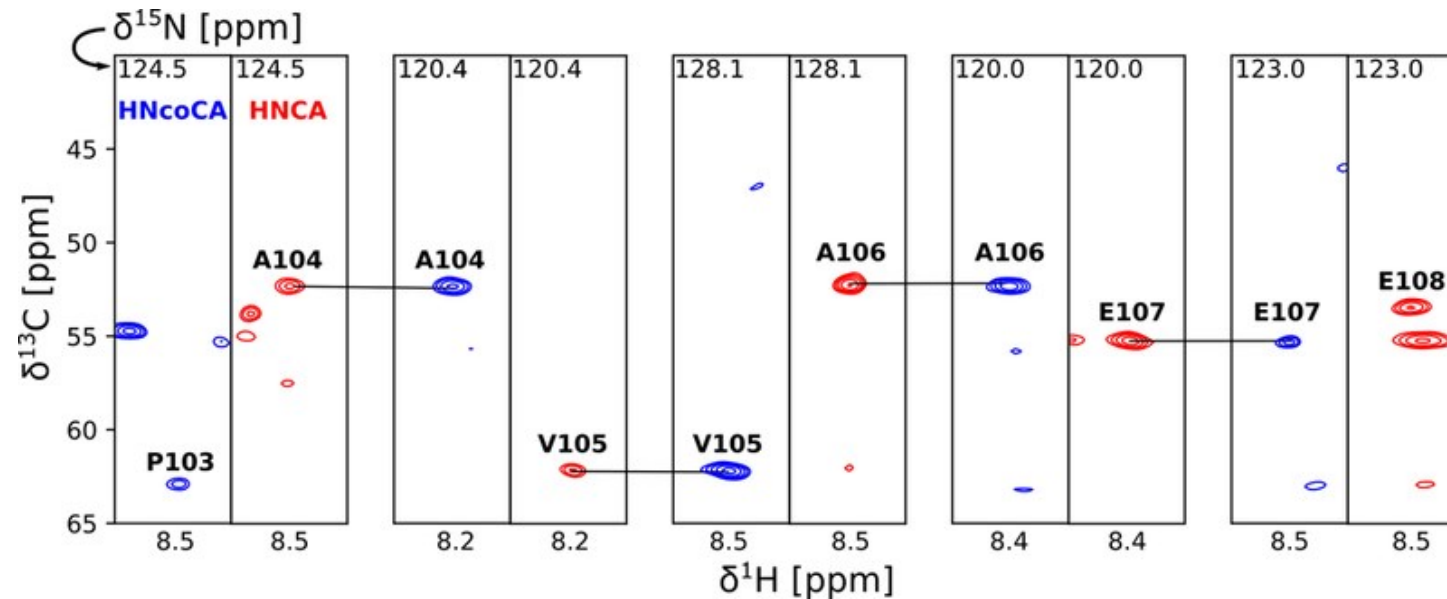
Motivation

- Das $^1\text{H}, ^{15}\text{N}$ -HSQC ist ein sehr wichtiges 2D-Experiment in der Protein-NMR
- Dauer: ~ 10 min
- Schnelleres Experiment mit derselben Anwendung: SOFAST-HMQC $\rightarrow \sim 4$ s



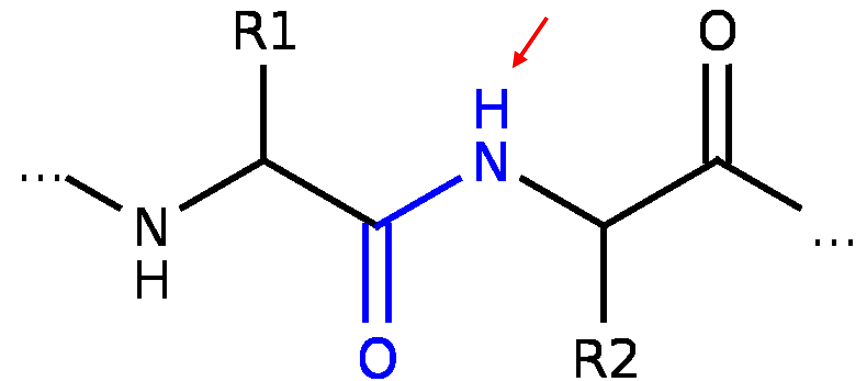
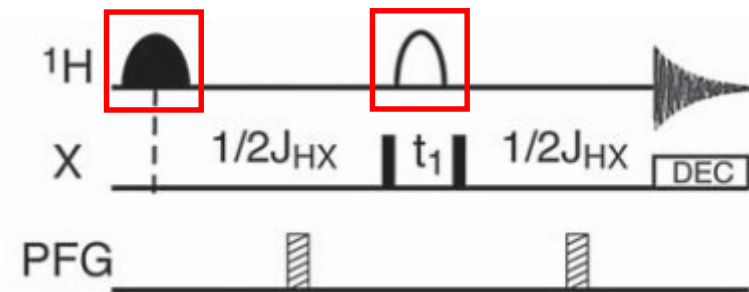
Motivation

- 3D-Experimente dauern noch länger, aber werden für sequentielle Zuordnung benötigt
- z. B. HNCOCA /HNCA, normalerweise: 12-20 h pro Experiment
- BEST-HNCOCA: ~ 1 h



SOFAST-HMQC Pulssequenz

- Es werden **selektive Pulse** verwendet, damit nur die Amid-Protonen angeregt werden
- Der optimale Anregungswinkel des ersten ^1H -Pulses wird am Anfang bestimmt



Ziel: Optimierung besserer Pulse, die PC9 ersetzen

- Anregungswinkel muss linear skalierbar sein
- Möglichst unabhängig von Chem. Verschiebung
- Maximale Kopplungsevolution während dem Puls (für bessere Empfindlichkeit des Experiments)
- Neue Pulse sollen in verschiedene Pulssequenzen implementiert (das macht die Betreuerin) und an einer Ubiquitin-Probe getestet werden

Ressourcen

- Gruppeninterne Software zur Pulsoptimierung (OCTOPUS), die schon für einige Publikationen verwendet wurde.
- Python-Programm zum Simulieren der Pulse
- Pulssequenzen
- Ubiquitin-Probe