

Interferencja mechanizmów relaksacji spinów jądrowych w badaniach NMR białek

Bartłomiej Banaś

Kierownik: **prof. dr hab. Wiktor Koźmiński**

Opiekun: **dr Anna Zawadzka-Kazimierczuk**

Niemalą część białek obecnych w naturze stanowią białka natywnie nieustrukturyzowane, które mogą przyjmować formy o różnych strukturach, jednocześnie wykazując rozmaite funkcje biologiczne [1]. Konieczne jest opracowywanie skutecznych metod badania struktury takich białek.

Interferencja mechanizmów relaksacji spinów jądrowych (CCR), polegająca na konstruktywnym lub destruktywnym sumowaniu się różnych mechanizmów relaksacji, prowadzi do zmian intensywności pików w widmach NMR [2]. Stosunek intensywności pików w widmie „auto” (bez interferencji) oraz w widmie „cross” (z interferencją) zawiera informację na temat poszczególnych kątów dwuściennych w cząsteczce. Szeroki zestaw eksperymentów NMR pozwala określać wartości tych kątów, co można wykorzystać do badania struktury białek, a w szczególności przejściowych elementów struktury białek nieustrukturyzowanych [3]. Celem przeprowadzonych badań było opracowanie nowych wielowymiarowych eksperymentów wykorzystujących zjawisko CCR, które można byłoby wykorzystać do badania białek nieustrukturyzowanych.

Opracowano trzy nowe eksperymenty CCR NMR, pozwalające na pomiar interferencji różnych oddziaływań dipol-dipol: $N_iH_i^N-CA_iHA_i$, $N_iH_i^N-CA_{i-1}HA_{i-1}$ oraz $N_iH_i^N-N_{i-1}H_{i-1}^N$. Eksperymenty te zaprogramowano oraz zweryfikowano poprzez rejestrację widm ubikwityny, białka ustrukturyzowanego zawierającego 76 reszt aminokwasowych. Uzyskano szereg stałych CCR dla kolejnych reszt ubikwityny, które porównano z wartościami przewidywanymi na podstawie opublikowanych struktur tego białka, zgodność otrzymanych wartości była zadowalająca. Kolejnym etapem badań będzie próba wykorzystania opracowanych eksperymentów do określenia struktury białka nieustrukturyzowanego.

Literatura:

[1] DeForte S., Uversky V. N., RSC Adv. 2016, 6, 11513.

[2] Levitt M. H., Spin dynamics: basics of Nuclear Magnetic Resonance, John Wiley & Sons, Chichester 2008.

[3] C. Kauffmann, Zawadzka-Kazimierczuk A., Kontaxis R., Konrat R., ChemPhysChem. 2020, 21, 1.