Modelling copper-containing proteins

Bosch, Marieke van den

MODELLING COPPER-CONTAINING PROTEINS

Proefschrift

ter verkrijging
van de graad van Doctor
aan de Universiteit Leiden,
op gezag van de Rector Magnificus
dr. D.D. Breimer, hoogleraar in de
faculteit der Wiskunde en Natuurwetenschappen
en die der Geneeskunde, volgens besluit
van het College voor Promoties te
verdedigen op 18 januari 2006
klokke 16.15 uur.

door

Marieke van den Bosch

geboren te Helmond in 1975

Promotiecommissie:

Promotor:	Prof. dr. G. W. Canters
Referent:	Prof. dr. A. E. Mark (University of Queensland, AUS)
Overige leden:	Prof. dr. H. J. C. Berendsen (Rijks Universiteit Groningen) Prof. dr. J. Brouwer Prof. dr. W. F. van Gunsteren (Eidgenössische Technische Hochschule Zürich, CH) Prof. dr. M. C. van Hemert

These investigations were supported by the Netherlands Research Council for Chemical Sciences (NWO-CW)

Voor mijn ouders

Omslag voorzijde

Leÿda, Batavorum Lugdunum, volgo Leÿden, concinna edificiorum et incolarum freque[n]tia pulcherrimum nitidissimumq[ue] opp[idum] ab Hispanis obsidione cinctum, ab Auriacis autem com[m]eatus invectione liberatum anno parte salutis MDLXXIIII.
vrij vertaald:
Leÿda, Lugdunum van Batavia, ook bekend als Leÿden, versierd door gebouwen en gevuld met bewoners, mooie en blinkende stad, bezet door de Spanjaarden en bevrijd door de Prins van Oranje in het jaar 1574.
[Braun en Hogenberg, 1576]

Omslag achterzijde, van boven naar beneden

Kaart van Leiden en omgeving, kopie uit de 19-de eeuw
[Sluyter, 1550]

Leiden
[Blaeu, 1649]

Beschrijving der Stad Leyden
[Orlers, 1780]

Stafkaart Leiden en omgeving
[Topografische dienst, 2005]

Met dank aan A. van Benthem, Regionaal Archief Leiden en Y. A. Meurs Antiquariaat

Printed by: Optima Grafische Communicatie, Rotterdam

CONTENTS

ABBREVIATIONS

2,3QD	2,3 quercetin dioxygenase
DFT	Density Functional Theory
EPR	Electron Paramagnetic Resonance
IR	Infra-Red
KMP	kaempferol
MD	Molecular Dynamics
MM	Molecular Mechanics
NMR	Nuclear Magnetic Resonance
PC	Plastocyanin
QM	Quantum Mechanics
RR	resonance Raman
RMS	root mean square
wt	wild type
UV-vis	ultraviolet and visible light
UFF	Universal Force Field
XRD	X-ray Diffraction