



Universiteit
Leiden
The Netherlands

High-frequency EPR on high-spin transitions-metal sites

Mathies, G.

Citation

Mathies, G. (2012, March 1). *High-frequency EPR on high-spin transitions-metal sites*. *Casimir PhD Series*. Retrieved from <https://hdl.handle.net/1887/18552>

Version: Not Applicable (or Unknown)

License: [Leiden University Non-exclusive license](#)

Downloaded from: <https://hdl.handle.net/1887/18552>

Note: To cite this publication please use the final published version (if applicable).

Cover Page



Universiteit Leiden



The handle <http://hdl.handle.net/1887/18552> holds various files of this Leiden University dissertation.

Author: Mathies, Guinevere

Title: High-frequency EPR on high-spin transition-metal sites

Issue Date: 2012-03-01

Stellingen

Behorende bij het proefschrift

High-frequency EPR on high-spin transition-metal sites

1. Overgangsmetaalcentra in eiwitten en enzymen vertonen in het algemeen geen symmetrie. Dit maakt het zonder een expliciete kwantumchemische berekening bijzonder moeilijk uitspraken te doen over het verband tussen de geometrische structuur, de elektronische structuur en de functie van deze centra.
Hoofdstuk 3 van dit proefschrift
2. De natuurlijke variatie in de structuur van de actieve centra van eiwitten en enzymen bemoeilijkt niet alleen de observatie, maar ook de interpretatie van hun EPR spectrum.
Hoofdstuk 3 en 6 van dit proefschrift
3. De structuur die het complex $\text{Fe}[(\text{SPPPh}_2)_2\text{N}]_2$ aanneemt in een kristal verschilt van de structuur die voor kristallen van dit complex bepaald is met behulp van Röntgendiffractie.
Hoofdstuk 5 van dit proefschrift
4. Het biochemisch onderzoek aan het eiwit transferrin zou veel baat hebben bij hoogfrequente EPR spectroscopie.
Hoofdstuk 6 van dit proefschrift
5. Op dit moment is de belangrijkste uitdaging in de ontwikkeling van hoogfrequente EPR spectrometers het evenaren van de concentratiegevoeligheid die bij lagere frequenties, zoals X band, reeds gerealiseerd is. Een volgende stap is het verwezenlijken van de toename van de concentratiegevoeligheid met de microgolffrequentie volgens $1/\omega^{3/2}$, die de theorie voorspelt.
Charles P. Poole Jr., Electron Spin Resonance - A comprehensive treatise on experimental techniques, John Wiley & Sons, 1983
6. Door de ligandering van bepaalde overgangsmetaal-ionen, zoals high-spin Fe(II), slim te kiezen kan een systeem worden gerealiseerd met een grote negatieve nulveldsplitting en een grote anisotropie. Gedegen begrip van hoe deze nulveldsplitting tot stand komt, is van grote betekenis voor de ontwikkeling van enkel-moleculaire magneten.
Frank Neese and Dimitrios A. Pantazis, Faraday Discuss., 148 (2011) 229-238
7. De conclusie van Boereboom *et al.* dat de goede overeenkomst van de door Wirtz *et al.* berekende frequenties van de resonante-Raman overgangen van sferoïden in het reactiecentrum van *Rhodobacter sphaeroides* met de experimentele observaties ten minste deels op toeval berust, is voorbarig.
Jelle M. Boereboom, Marc C. van Hemert, and Johannes Neugebauer, ChemPhys-Chem, 12 (2011) 3157-3169

8. Een beschrijving van de EPR spectra van high-spin overgangsmetaalcentra in eiwitten en enzymen met een spin Hamiltoniaan die “hogere-orde termen” bevat, is fysisch niet zinvol.

Wilfred Raymond Hagen, Biomolecular EPR Spectroscopy, CRC Press, 2009

9. De trage overschakeling van onze maatschappij naar duurzame energiebronnen is slechts voor een klein deel te wijten aan de moeilijkheid om deze bronnen aan te boren en de complexiteit van de implementatie. Veel belangrijker is de geringe motivatie voor een dergelijke overschakeling, zowel in de politiek als bij individuele burgers.

Guinevere Mathies
Leiden, februari 2012