

English Abstract

The present study outlines the useability of two plant *O*-methyl transferases (*O*-MTs), phenylpropanoid and flavonoid *O*-methyl transferase (PFOMT) and soy *O*-methyl transferase (SOMT-2), of classes I and II for the biocatalytic methylation of common structural motifs encountered throughout the group of in plant polyphenolic compounds.

PFOMT was biophysically characterized through and the solution of a novel crystal structure of its *apo*-form.

In vivo studies using SOMT-2 showed its capability to methylate flavonoids and stilbenes at the 4'-position.

It was demonstrated that the activity of class I plant *O*-MT, PFOMT, could be modulated by pH and magnesium concentration to achieve previously unobserved methylations of non-catecholic moieties.

Additionally, a systematic grid of 15 flavonoids with different substitutions at the B-ring was characterized by tandem mass-spectrometry (MS/MS) studies through higher-energy collisional dissociation (HCD) and collision induced dissociation (CID).

Keywords: methyl transferase, flavonoid, PFOMT, SOMT-2, design of experiments, refolding, CID, HCD

Deutsche Zusammenfassung

Die vorliegende Arbeit umreißt die Verwertbarkeit zweier pflanzlicher O-Methyltransferasen (O-MTs), PFOMT und SOMT-2, der Klassen I and II für die biokatalytische Methylierung in polyphenolischen Verbindungen verbreiteter Struktur motive.

Die PFOMT wurde mithilfe der isothermen Titrationskalorimetrie sowie der Lösung einer Kristallstruktur des *apo*-Enzyms biophysikalisch charakterisiert.

In vivo Studien der SOMT-2 zeigten die Methylierung von Flavonoiden und Stilbenen an der 4'-Position.

Es wurde gezeigt, dass die Aktivität der PFOMT durch Variation von pH-Wert und Magnesium so weit moduliert werden kann, dass vorher unbeschriebene Methylierungen von nicht-catecholen Motiven möglich sind.

Zuletzt wurden fünfzehn Flavonoide mit unterschiedlichen Substitutionsmustern am B-Ring mittels Tandem-Massenspektrometrie (MS/MS) durch *collision induced dissociation* (HCD) und *higher-energy collisional dissociation* (CID) charakterisiert.

Stichworte: Methyltransferase, Flavonoid, PFOMT, SOMT-2, statistische Versuchsplanung, Rückfaltung, CID, HCD