

Magnetische Resonanz

SS 2007

Dieter Suter, Roland Böhmer, Burkhard Geil

12. Juli 2007

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	5
2	Grundlagen und Wechselwirkungen	6
3	Statik und Dynamik von Spinsystemen	7
4	Echos	8
5	2D NMR	9
5.1	Motivation und Grundlagen	9
5.1.1	Korrelation	9
5.1.2	Prinzip	10
5.1.3	Informationstransfer	10
5.1.4	Datensatz	11
5.1.5	2D Fouriertransformation	12
5.1.6	Informationsgehalt der Spektren	12
5.1.7	Spektren mit mehr als 2 Dimensionen	13
5.2	Austausch	13
5.2.1	Motivation und Phänomenologie	13
5.2.2	Signal im Zeitbereich	14
5.2.3	Linienformen	15
5.2.4	2D Austausch	16
5.2.5	Spindiffusion	17
5.2.6	Anwendungsbeispiel	17
5.2.7	NOESY: Prinzip	18
5.2.8	Signale	19
5.2.9	Austauschmechanismen	19
5.2.10	Zeitabhängigkeit	20
5.3	Korrelationsspektroskopie	20
5.3.1	COSY	20
5.3.2	Zeitentwicklung	21
5.3.3	Form und Interpretation des Spektrums	22
5.3.4	Beispiele	23
5.3.5	Weitere Anwendungen	24
5.3.6	Heteronukleare Korrelationsexperimente	24

6	NMR von Proteinen	26
6.1	Proteine	26
6.1.1	Motivation und Grundlagen	26
6.1.2	Strukturbestimmung	26
6.1.3	Aminosäuren und Peptide	27
6.1.4	Strukturen	27
6.1.5	Funktion	29
6.2	Methodik der Strukturaufklärung	29
6.2.1	NMR von Proteinen	29
6.2.2	Empfindlichkeit und Linienbreite	30
6.2.3	Zuordnung der Spektren	31
6.2.4	Proteinfragmente	32
6.2.5	Heteronukleare Experimente	33
6.2.6	3D Experimente	33
6.2.7	Dipolkopplungen	34
6.3	Anwendungsbeispiele	35
6.3.1	BPTI: Primär- und Sekundärstruktur	35
6.3.2	Tertiärstruktur	36
6.4	Festkörper	37
6.4.1	Grundlagen	37
6.4.2	Magisch Winkel Rotation (MAS)	38
6.4.3	Seide	39
6.4.4	Lichtinduzierte Konformationsänderung	40
7	Optische Methoden	42
7.1	Motivation und Grundlagen	42
7.1.1	Laserspektroskopie	42
7.1.2	Empfindlichkeit	42
7.1.3	Motivation	44
7.2	Laserspektroskopie	44
7.2.1	Optische Übergänge	44
7.2.2	Laserlicht	44
7.2.3	Anwendungen des Lasers	45
7.2.4	Optische Zweiniveausysteme	46
7.2.5	Hamiltonoperator und Bewegungsgleichung	46
7.3	Erhöhung der Spinpolarisation	47
7.3.1	Drehimpuls und Auswahlregeln	47
7.3.2	Optisches Pumpen	48
7.3.3	Bewegungsgleichung	49
7.3.4	Polarisierte Edelgase	50
7.3.5	Spektrales Lochbrennen	51
7.4	Optische Detektion	51
7.4.1	Grundlagen	51
7.4.2	Transmissionsmessung	52
7.5	Kohärente Ramanstreuung	53
7.5.1	Streuprozess	53
7.5.2	Heterodynachweis	53

7.5.3	Kernspins in dielektrischen Kristallen	54
7.5.4	Raman-Heterodyn ESR an Übergangsmetallen	55
7.6	GaAs	56
7.6.1	Halbleiter-Quantenstrukturen	56
7.6.2	Optisches Pumpen in Halbleiter-Quantenfilmen	56
7.6.3	Polarisierte Kernspins	57
7.6.4	Optische Detektion	58
7.6.5	NMR in Multiquantenfilm Systemen	59
7.6.6	Feinstruktur und Informationsgehalt	60
7.7	Oberflächen-selektive magnetische Resonanz	61
7.7.1	Oberflächenempfindliche optische Spektroskopie	61
7.7.2	Spinabhängige Messungen	62
7.8	Magnetische Resonanz an Einzelmolekülen	62
7.8.1	Optische Spektroskopie von Einzelmolekülen	62
7.8.2	ESR an angeregten Triplets	63

Literaturverzeichnis	65
-----------------------------	-----------