



GESELLSCHAFT DEUTSCHER CHEMIKER

**Wissenschaftlicher
Pressedienst Chemie**

37/16
12. August 2016

**PRESSE-
INFORMATION**

Aktuelles aus der Magnetischen Resonanzspektroskopie

Biochemische und molekularbiologische Fragen klären

Die Fachgruppe Magnetische Resonanzspektroskopie der Gesellschaft Deutscher Chemiker (GDCh) trifft sich zu ihrem 38th FGMR Discussion Meeting vom 12. bis 15. September 2016 an der Düsseldorfer Heinrich-Heine-Universität. Die Konferenz wird mit der Felix-Bloch-Lecture, einer Auszeichnung, die in diesem Jahr zum zweiten Mal vergeben wird, eröffnet. Am zweiten Konferenztag werden zum 20. Mal die Ernst Awards an drei Nachwuchswissenschaftler verliehen.

Die Felix-Bloch-Lecture ist nach einem der beiden Begründer der Magnetischen Resonanzspektroskopie – auch als Kernresonanzspektroskopie oder NMR-Spektroskopie bezeichnet – benannt. Er erhielt 1952 für die Entdeckung der magnetischen Kernresonanz den Nobelpreis für Physik. Richard Ernst, der einen wichtigen Meilenstein in der Weiterentwicklung der NMR-Spektroskopie setzte, erhielt dafür 1991 den Nobelpreis für Chemie. Felix-Bloch-Lecturer ist in diesem Jahr Dr. Björn Corzilius von der Frankfurter Goethe-Universität. Mit den Ernst Awards werden Christian Hintze (Universität Konstanz), Katharina Märker (Universität Grenoble) und Johannes Wittmann (Universität Frankfurt und ETH Zürich) ausgezeichnet.

Die NMR-Spektroskopie beruht auf einer resonanten Wechselwirkung zwischen dem magnetischen Moment von Atomkernen einer Probe mit einem äußeren Magnetfeld. Diese Resonanz kann mit Hilfe hochfrequenter magnetischer Wechselfelder ermittelt werden. Nur solche Isotope sind dieser Methode zugänglich, die im Grundzustand einen Kernspin und damit ein magnetisches Moment besitzen, wie beispielsweise ^1H , ^{13}C , ^{15}N , ^{19}F , ^{31}P , ^2D , ^6Li oder ^{17}O . Mit dieser Methode ist es möglich, Informationen über die chemische Umgebung der Atome, über die Struktur der

GDCh-Öffentlichkeitsarbeit
Postfach 90 04 40
D-60444 Frankfurt am Main
Tel.: 069/7917-493
Fax: 069/7917-1493
E-Mail: pr@gdch.de

Diesen Text können Sie im
Internet abrufen unter
<http://www.gdch.de>

entsprechenden Moleküle und die Bewegungen der entsprechenden Moleküle im Sekunden- bis Nanosekunden-Bereich zu erhalten. Mit Hilfe von Magnetfeldgradienten wird die Methode der Kernspinresonanz auch zur Bildgebung beispielsweise in der medizinischen Diagnostik eingesetzt. Auf den gleichen physikalischen Prinzipien beruht die Elektronenspinresonanz (EPR), bei der das magnetische Moment von Elektronenspins ausgenutzt wird. Mit dieser Methode werden Proben untersucht, die ungepaarte Elektronen enthalten, wie beispielsweise stabile organische Radikale oder Übergangsmetalle. Mithilfe resonanter Mikrowellen lassen sich Umgebung, Dynamik und Abstände verschiedener Elektronenspins, also wiederum auch Strukturen und räumliche und strukturelle Veränderungen, bestimmen.

Die Vorträge auf der Düsseldorfer Tagung befassen sich mit der Anwendung beider Methoden auf aktuelle Fragestellungen aus der medizinischen Chemie, der Biochemie oder der Festkörperchemie. Vorgestellt werden u.a. Untersuchungen über Konformationsänderungen, also Änderung der räumlichen Struktur bei Proteinen, was für molekularbiologische Vorgänge von Bedeutung ist. Hier geht es beispielsweise um Störungen der Proteinfaltungen bei verschiedenen Proteinfehlfaltungskrankheiten, u.a. der Alzheimer-Krankheit oder Typ-II-Diabetes, um Bindungsstudien an DNA und um ein besseres Verständnis enzymatischer Reaktionen oder von Prozessen an biologischen Membranen.

Der mit der Felix-Bloch-Vorlesung ausgezeichnete Björn Corzilius stellt in seinem Vortrag methodische Fortschritte bei der dynamischen Kernpolarisation (DNP) in der ^{13}C - und ^{15}N -NMR-Spektroskopie vor. Mit dieser Methode gelingt es, die Polarisierung von Elektronenspins auf den Kernspin zu übertragen und die Empfindlichkeit der Messungen um zwei Größenordnungen zu steigern. Ernst-Preisträgerin Katharina Märker hat diese Technik der Signalverstärkung in ihrer ausgezeichneten Arbeit „A new tool for NMR Crystallography: Complete $^{13}\text{C}/^{15}\text{N}$ assignment of organic molecules at natural isotopic abundance using DNP-enhanced solid-state NMR“ verwendet. Weil es damit möglich wurde, die Resonanzen in den Molekülen eindeutig zuzuordnen, gelang ihr ein großer Durchbruch bei der Strukturaufklärung kristalliner organischer Substanzen. Johannes Wittmann befasst sich mit der Verbesserung von Radiofrequenzpulssequenzen zur Aufnahme mehrdimensionaler NMR-Spektren. In seiner theoretisch orientierten Arbeit „Quantification and compensation of the influence of pulse transients on symmetry-based recoupling sequences“ hat er die Auswirkungen von Pulsimperfectionen auf verschiedene Pulssequenzen berechnet sowie drei Ansätze zur Kompensation dieser Auswirkungen untersucht mit dem Ziel, die Reproduzierbarkeit von NMR-Experimenten deutlich zu erhöhen. Christian Hintzes Arbeit „Laser-induced magnetic dipole spectroscopy“ führt eine neuartige Methode der gepulsten EPR-Spektroskopie ein: Statt, wie bislang, den Abstand zwischen zwei stabilen Radikalen (Elektronenspins) zu bestimmen, wird bei dieser

Methode einer der beiden elektronischen, magnetischen Momente erst während des Experiments durch einen Laserpuls, der in diesem Fall einen Porphyrinrest in einen Triplettzustand anregt, generiert.

Weitere Informationen unter: www.fgmr2016.de

Die Gesellschaft Deutscher Chemiker (GDCh) gehört mit über 31.000 Mitgliedern zu den größten chemiewissenschaftlichen Gesellschaften weltweit. Sie hat 28 Fachgruppen und Sektionen, darunter die Fachgruppe Magnetische Resonanzspektroskopie mit derzeit 471 Mitgliedern. Die Aktivitäten der Fachgruppe umfassen die jährliche Diskussionstagung mit Beiträgen aus allen Fachgebieten der magnetischen Resonanz, verschiedenen Fortbildungs- und Informationsveranstaltungen, die von der GDCh angeboten werden, sowie mehrere Spezialveranstaltungen, die von aktiven Mitgliedern zu besonderen Schwerpunktthemen organisiert werden.