

Vorlesung „Mehrdimensionale NMR-Spektroskopie - Grundlagen und Anwendung in der Strukturaufklärung“ (TU Berlin)

10-teilige Vorlesung, 10 x 2 Stunden

1. Theoretische Grundlagen (1)

Einleitung

Grundlagen der NMR-Spektroskopie

Das rotierende Koordinatensystem

Detektion des Signals

Fouriertransformation

2. Theoretische Grundlagen (2)

NMR-Parameter

Theoretische Beschreibung von NMR-Experimenten (1)

Vektormodel

Das NMR-Spektrometer

3. Produktoperatorformalismus

Produktoperatorformalismus

Berechnung von „building blocks“

INEPT, DEPT

Empfindlichkeit von NMR-Experimenten

4. Mehrdimensionale NMR-Spektroskopie

Theoretische Beschreibung von NMR-Experimenten (2)

Mehrdimensionale NMR-Spektroskopie (1)

COSY

DQF-COSY

Das DQF-COSY von Menthol

5. Heteronukleare NMR-Spektroskopie

Mehrdimensionale NMR-Spektroskopie (2)

HETCOR, COLOC, HMQC, HMBC

Ein Beispiel

6. NMR-Spektroskopie an Peptiden (1)

Peptide

DQF-COSY, TOCSY

Spinsysteme

NOE und NOESY, ROESY

sequenzspezifische Zuordnung

Bestimmung der 3D-Struktur

7. NMR-Spektroskopie an Peptiden (2)

Heteronukleare NMR-Spektroskopie an Peptiden

HMQC und BIRD-Puls

HMQC-TOCSY, HMQC-COSY

DEPT-HMQC

HMBC und sequenzspezifische Zuordnung

8. NMR-Spektroskopie an Peptiden (3)

Bestimmung von Kopplungskonstanten

Kopplungskonstanten als Strukturparameter

Das Problem mit der Linienbreite

Kim/Prestegard

E.COSY

HETLOC

9. NMR-Spektroskopie an Proteinen (1)

„dynamic range“ Problem

Lösungsmittelunterdrückung

Proteine, sequenzspezifische Zuordnung

Markierung

HSQC

3D, NOESY-HSQC

Screening

10. NMR-Spektroskopie an Proteinen (2)

Tripelresonanzexperimente

HNCA, HN(CO)CA

CBCACONNH, CBCANNH

HCCH-Experimente

große Proteine, TROSY