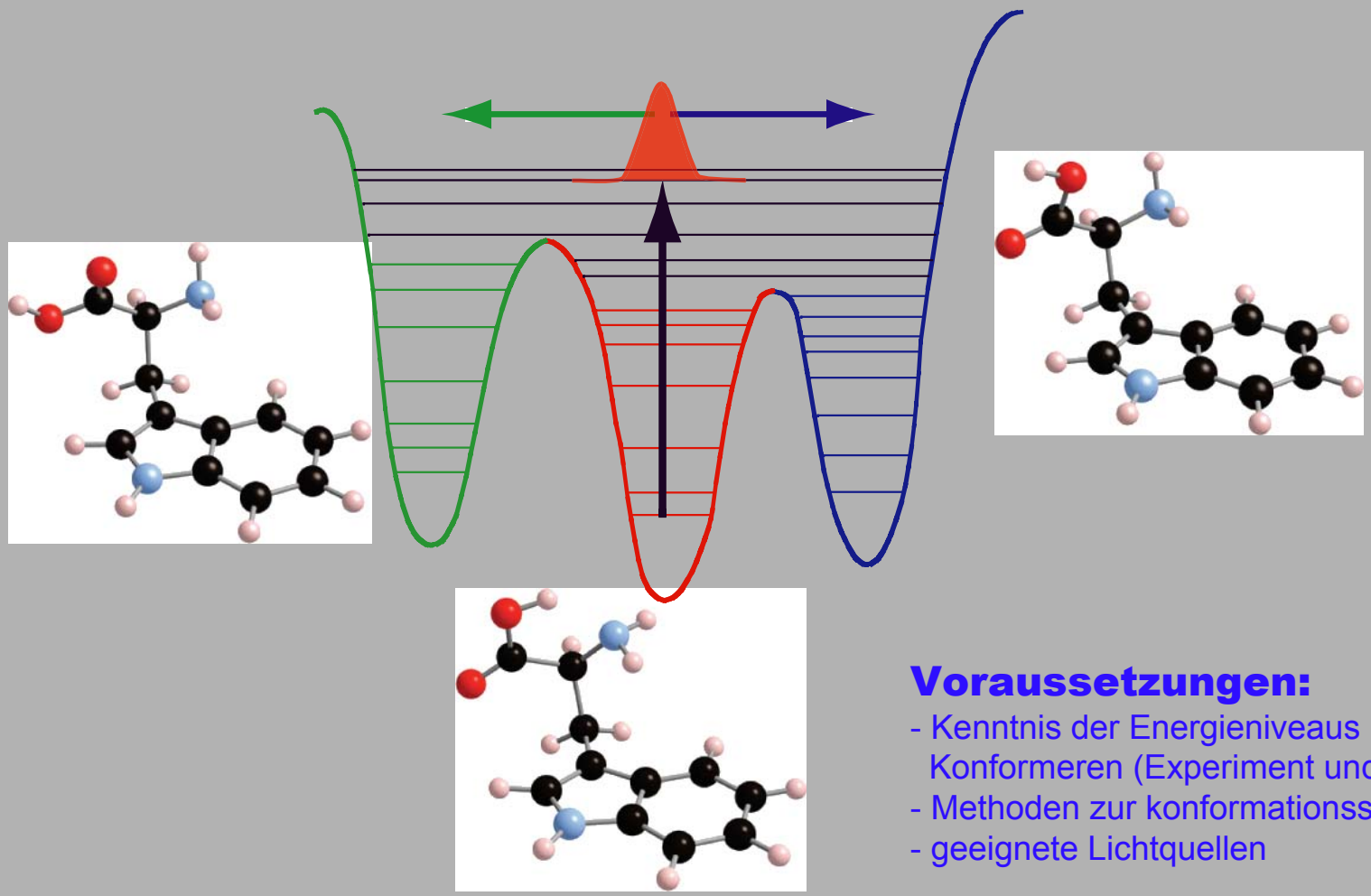
Fritz-Haber-Institut
der
Max-Planck-Gesellschaft

Photoinduzierte Konformationsänderungen in Gasphasen-Biomolekülen

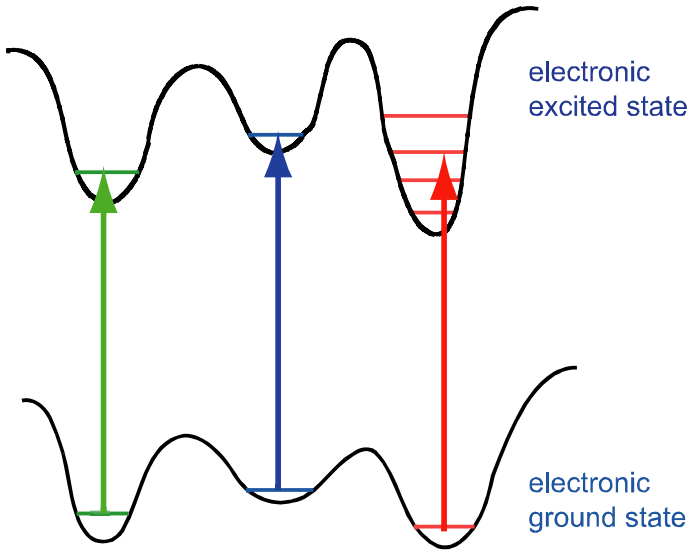
Wie kann die Konformationsdynamik in flexiblen Molekülen beeinflusst und kontrolliert werden?

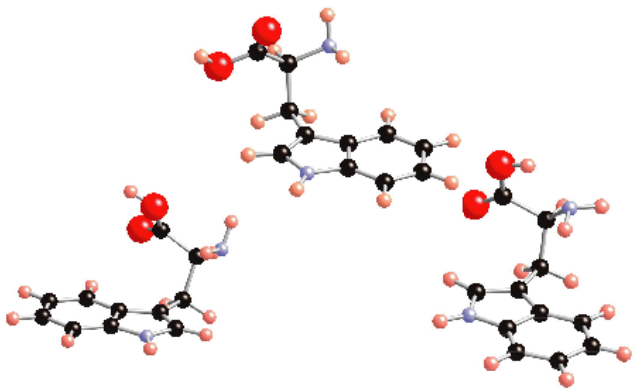


Voraussetzungen:

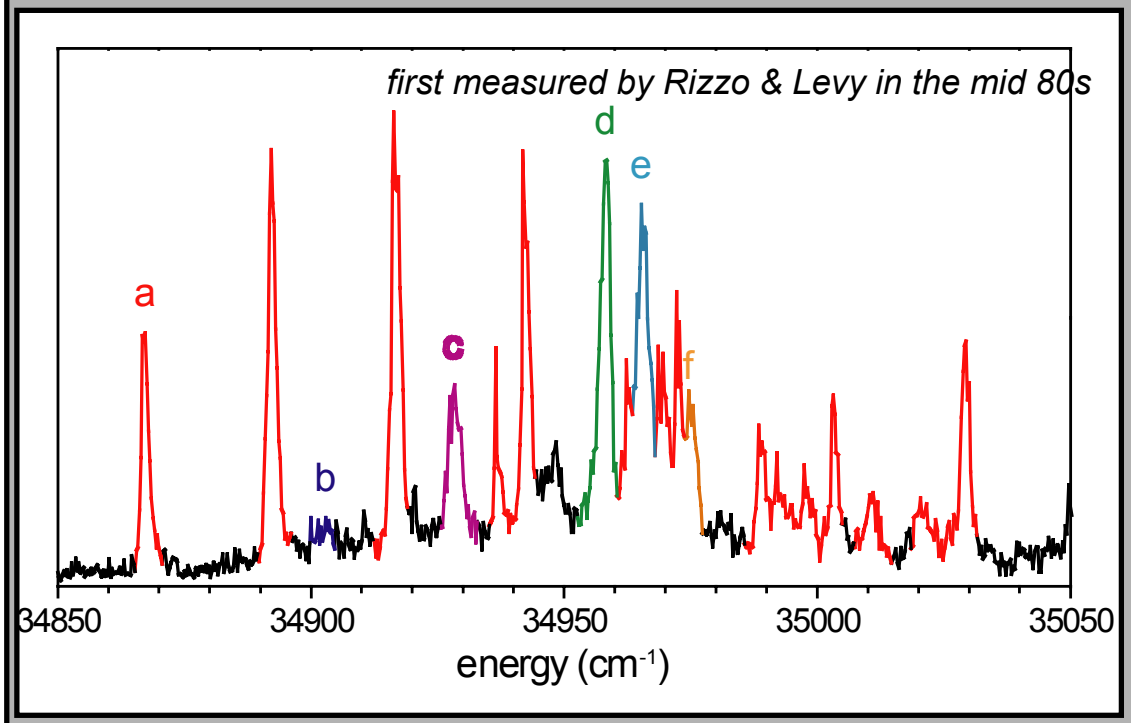
- Kenntnis der Energieniveaus in den verschiedenen Konformeren (Experiment und Theorie)
- Methoden zur konformationsselektiven Detektion
- geeignete Lichtquellen

Konformerspezifische Anregung und Ionisation





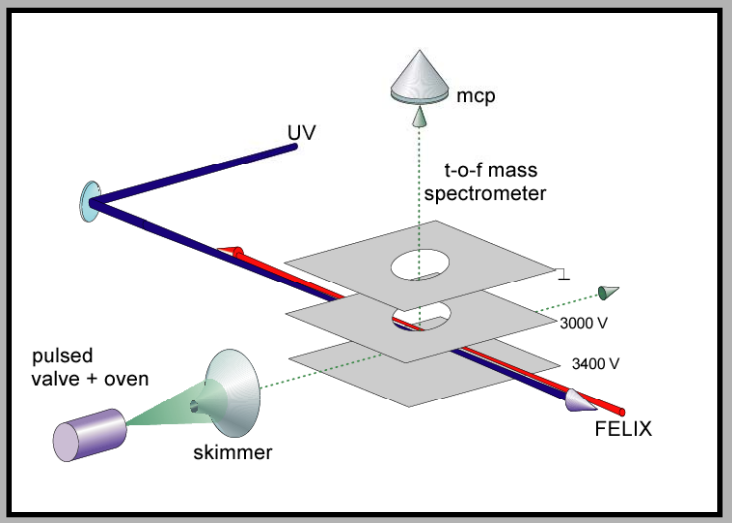
UV-Spektrum

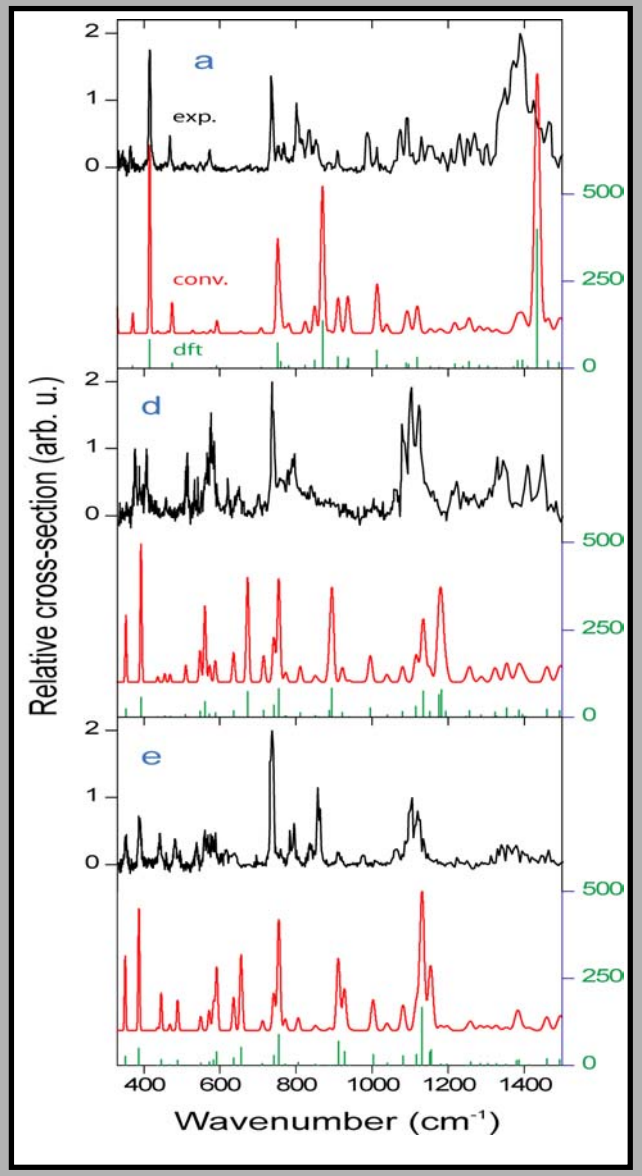


- Unterschiedliche Konformere können selektiv angeregt werden
- Tryptophan ist relativ klein, so dass genaue Rechungen möglich sind

Die IR-Spektren der Konformere a,d und e

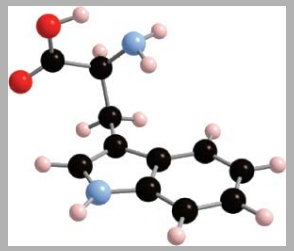
Experimenteller Aufbau



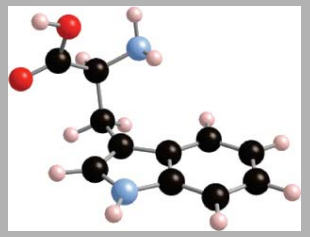


J. M. Bakker et al., PRL **91**, 203003 (2003)

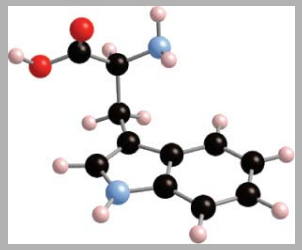
OH--NH_2 Brücke



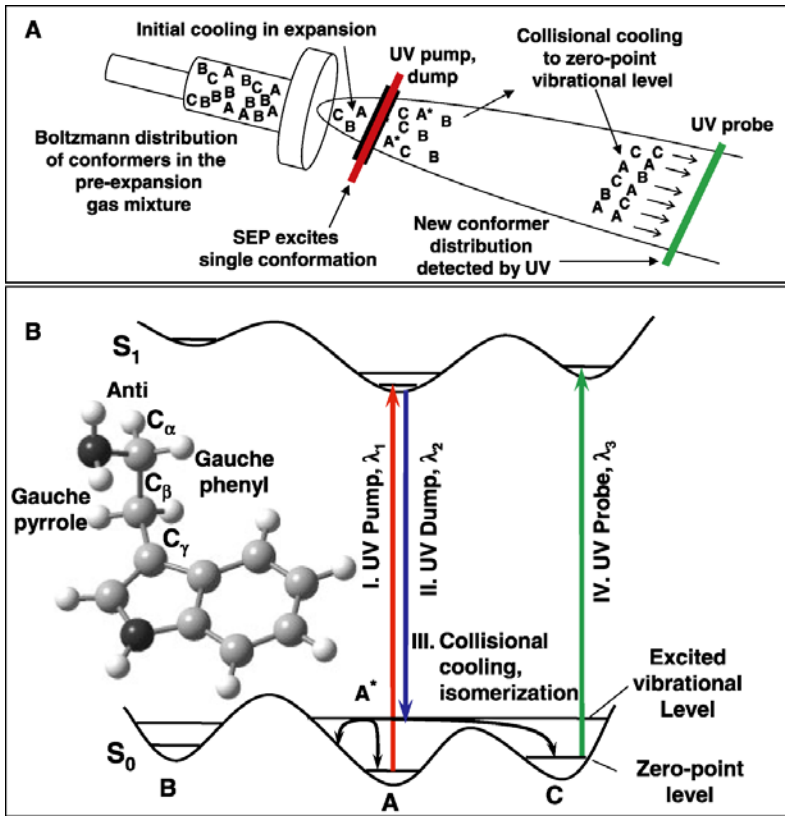
NH_2--OH Brücke



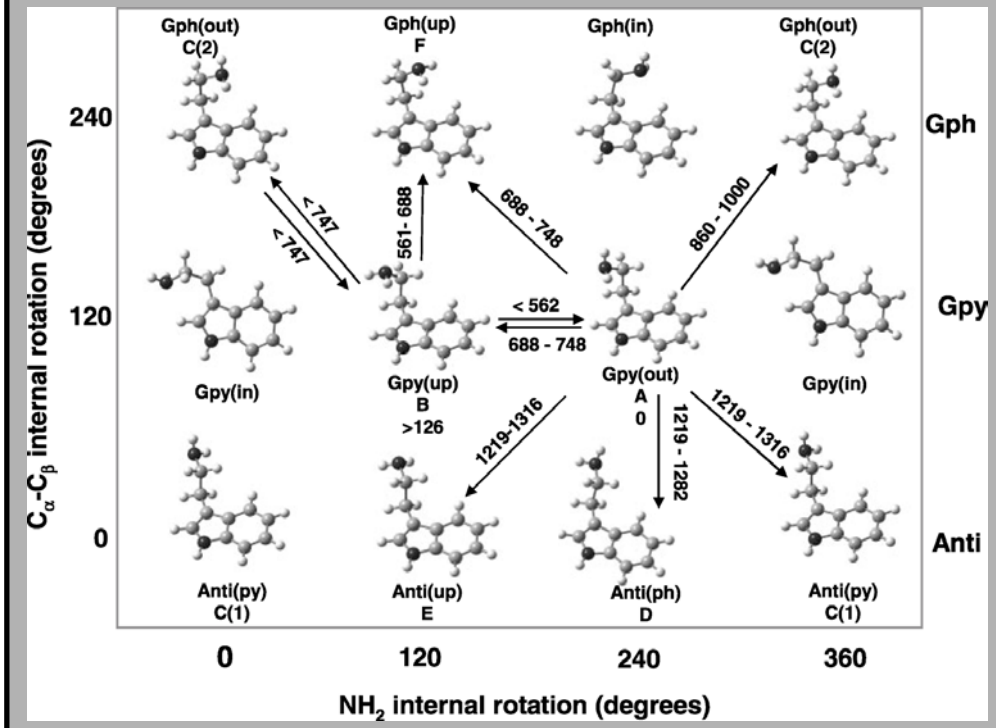
NH_2--O Brücke



Schwingungsinduzierte Konformationsänderungen

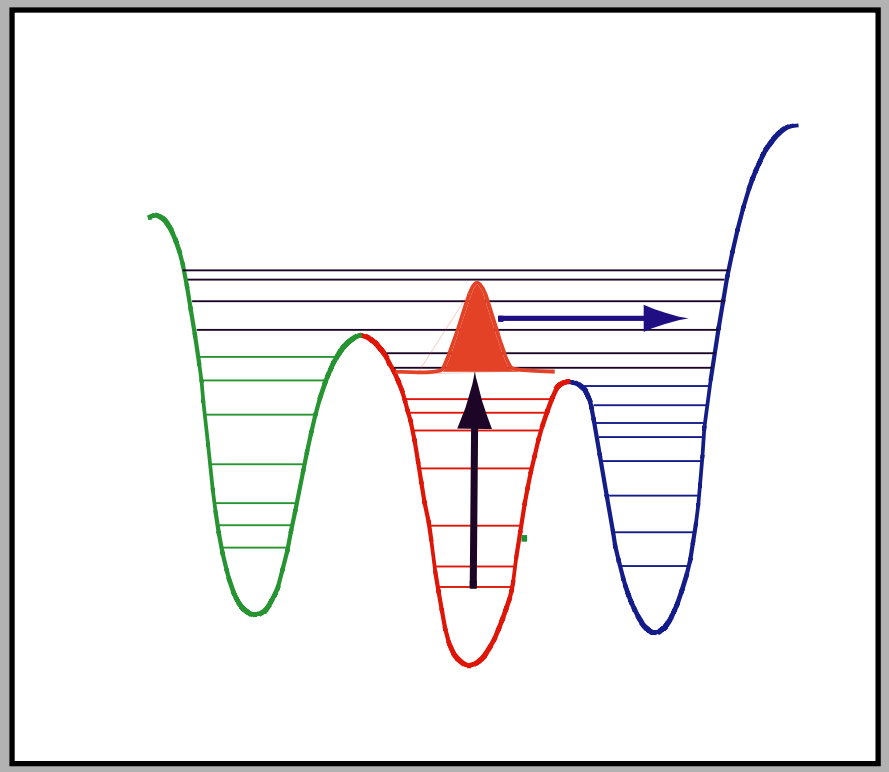


B.C. Dian, J.R. Clarkson, T.S. Zwier, *Science*, 303, 1169 (2004)



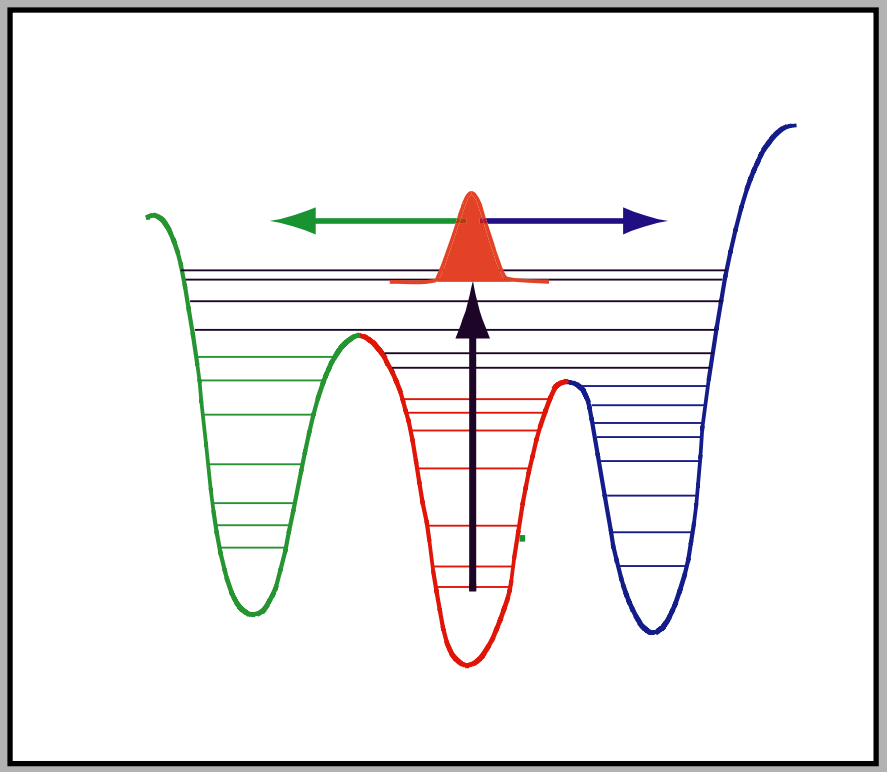
- Ein spezifisches Konformer wird durch „stimulated emission pumping“ (SEP) geheizt
- Kühlung durch Stöße entfernt überschüssige Energie
- Die neuen Strukturen werden durch UV-Anregung nachgewiesen

Konformationskontrolle mit modulierten IR-Pulsen



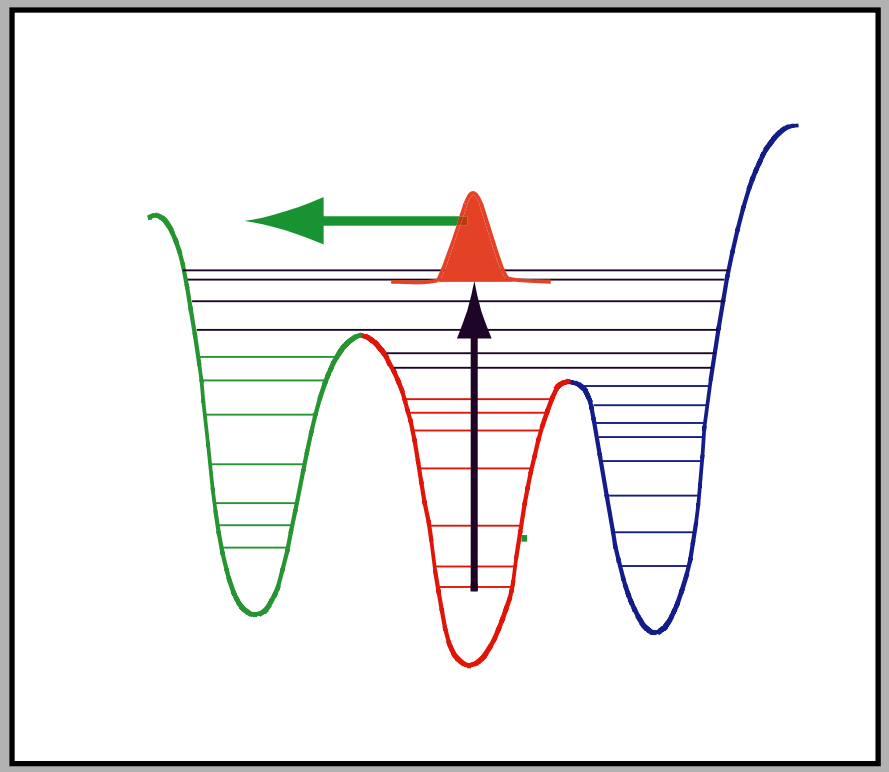
- Aus energetischen Gründen ist nur ein Konformer erreichbar

Konformationskontrolle mit modulierten IR-Pulsen

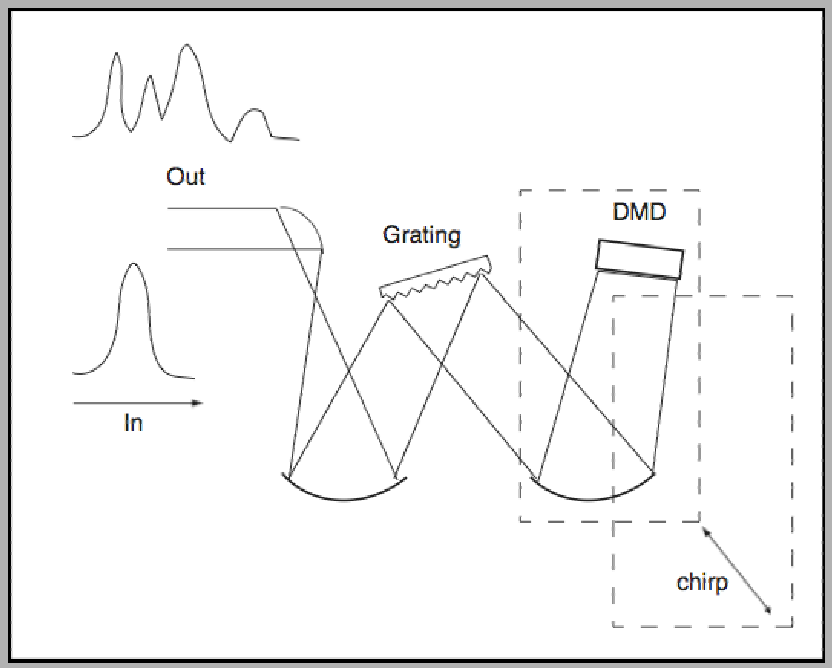


- Aus energetischen Gründen ist nur ein Konformer erreichbar
- Zwei Konformere werden statistisch besetzt

Konformationskontrolle mit modulierten IR-Pulsen



- Aus energetischen Gründen ist nur ein Konformer erreichbar
- Zwei Konformere werden statistisch besetzt
- Durch koherente Kontrolle wird geziehlt ein Konformer erreicht



Kooperationen: A1, A4, B2, C2, C5