

EPR-Spektroskopie an paramagnetischen Modellverbindungen

Ein häufiger Kritikpunkt an EPR-Abstandsmessungen^{[1]-[4]} ist, dass diese meist bei Temperaturen von ca. 40 K aufgesetzt werden müssen. Somit ist nicht automatisch garantiert, dass das zu untersuchende Biomolekül in der selben Form vorliegt wie unter physiologischen Bedingungen.

Die Abstandsextraktion basiert auf der anisotropen, dipolaren Wechselwirkung von ungepaarten Elektronen, die zu einer Linienverbreiterung im EPR-Spektrum führen. Allerdings konkurriert dieser Effekt mit einer durch die Rotation des Moleküls in Lösung einhergehenden Linienverbreiterung. Aus diesem Grunde wird die Probe in der Regel bei tiefen Temperaturen eingefroren, um die Rotation zu minimieren. Eine klare Trennung von Rotationlinienverbreiterung und dipolarer Linienverbreiterung in flüssiger Lösung könnte dazu führen, die Messtemperatur drastisch zu erhöhen. Als Vorarbeit wurde hierzu in der Gruppe eine Simulationsroutine entwickelt, die jedoch zunächst an Modellverbindungen kalibriert werden muss. Geeignete Systeme müssen mindestens zwei ungepaarte Elektronen mit einem Abstand von ca. 10 - 12 Å enthalten, um eine entsprechend große dipolare Wechselwirkung zu gewährleisten, chemisch stabil sein und keine interne Rotation der Spinsonden aufweisen. Außerdem sollte trotz des relativ kurzen Elektron-Elektron Abstandes keine Austauschwechselwirkung vorhanden sein.

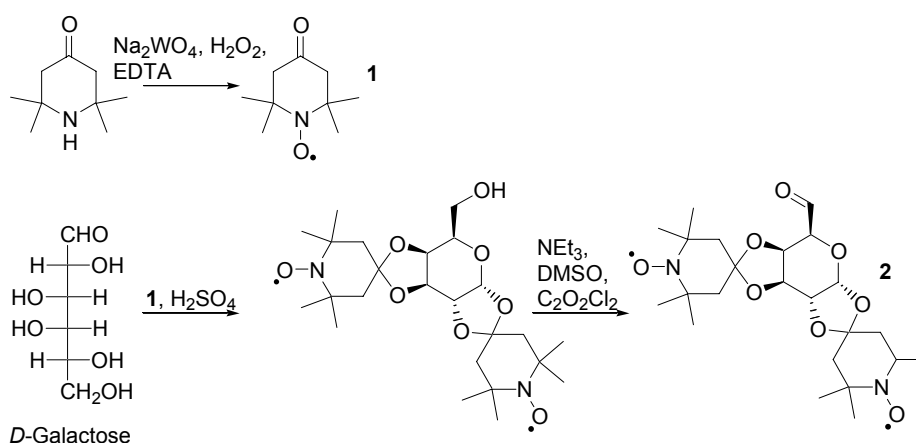


Abb.1: Im Rahmen der Bachelor-Arbeit analog Ref. 5 zu synthetisierendes Modellsystem (**2**) mit einem gerechneten Elektron-Elektron Abstand von ca.10 Å.

Verbindung **2** soll synthetisiert und anschließend EPR-spektroskopisch charakterisiert werden.

[1] O. Schiemann, N. Piton, Y. Mu, G. Stock, J. W. Engels, T. F. Prisner *J. Am. Chem. Soc.*, **126**, 5722, 2004

[2] B. E. Bode, D. Margraf, J. Plackmeyer, G. Dürner, T. F. Prisner, O. Schiemann, *J. Am. Chem. Soc.*, **129**, 6736, 2007.

[3] O. Schiemann, P. Cekan, D. Margraf, T. F. Prisner, S. Th. Sigurdsson, *Angew. Chem.*, 2009, **121**, 3342.

[4] D. Margraf, B. E. Bode, A. Marko, O. Schiemann, T. F. Prisner, *Mol. Phys.*, **105**, 2153, 2007.

[5] I. Hoppe, U. Schöllkopf, R. Tölle, *Synthesis*, 789, 1983.