

Development of Instrumentation and Software for 2D-IR Spectroscopy and Implementation of FT-VIPER Spectroscopy

Alexander Kondratiev und Asok Rafael Thun, Institut für Biophysik

Infrarotspektroskopie ist eine wichtige Untersuchungsmethode für Biomoleküle. Insbesondere die zweidimensionale Infrarotspektroskopie ermöglicht Einblicke auf kürzesten Zeitskalen (Femto- bis Picosekunden) und erlaubt Aussagen über molekulare Strukturen und Prozesse. Im einfachsten Experiment wird ein Molekül, beispielsweise ein Protein, mit einem Femtosekunden-Laserpuls angeregt. Die nachfolgende Veränderung des Moleküls kann mit einem zweiten Laserpuls, dem Probe-Puls, abgefragt werden. Die Variation der Pause zwischen Pump- und Probe-Puls erlaubt die Charakterisierung des zeitlichen Verlaufs der molekularen Veränderung. Komplexere Experimente können weitere Pulse beinhalten, deren zeitliche Abfolge genau kontrolliert werden muss. Dazu wird ein Versuchsaufbau mit vielen steuerbaren Komponenten benötigt, u. a. motorisierte Spiegel, Datenkarten, einem Spektrometer und weiteren elektrischen und mechanischen Bauteilen, die zueinander abgestimmt das 2D-IR Experiment durchführen.

Im Rahmen der Masterarbeit "Development of Instrumentation and Software for 2D-IR Spectroscopy and Implementation of FT-VIPER Spectroscopy" wurde die Software JAGAN entwickelt, die die einzelnen Instrumente im 2D-IR-Orchester dirigiert und so die Entwicklung neuer 2D-IR-Methoden vereinfacht. Als wichtigstes der auf dieser technischen Basis neu entwickelten Experimente ist das weltweit erste Fourier-Transform-VIPER-Experiment zu nennen. Durch die Kombination von IR- und UV/VIS-Pump-Pulsen werden eigentlich kurzlebige Zustände verlängert und dadurch messbar gemacht, selbst für Signalgrößen im μOD -Bereich.

Bei der Entwicklung der Software wurde auf eine Trennung der Verantwortungsbereiche im Programmcode geachtet: die Ansteuerung der Geräte, die Datenauswertung und die grafische Benutzerumgebung sind separat implementiert und erleichtern die Anpassung und Erweiterung auf neue Hardware bzw. die o. g. Implementation neuer Mess- oder Auswertungsroutinen. Ein besonderer Fokus lag bei der Entwicklung auf einer detaillierten Dokumentation, die u. a. über eine automatisch generierte Webseite abgerufen werden kann (<http://biophysik.org/~wille/jagan/>). Die Software soll zukünftig auch anderen 2D-IR-Arbeitsgruppen frei zugänglich gemacht werden.

Die Abbildung zeigt die Nutzeroberfläche von JAGAN während einer laufenden Messung.

