

Pressedienst Wissenschaft

17. Februar 2011

Messung dipolarer Restkopplungen auch an kleinen Molekülen:

Neue Methode zur Enträtselung molekularer Strukturen

Chemiker der Technischen Universität München (TUM) und des Karlsruher Institut für Technologie (KIT) haben eine neue Methode zur Identifizierung chemischer Verbindungen vorgestellt. Das angewandte Verfahren stellt eine Verfeinerung der Kernspinresonanzspektroskopie (NMR-Spektroskopie) dar, die sich über Jahrzehnte für die Strukturaufklärung organischer Moleküle bewährt hat. Die jetzt in der Fachzeitschrift „Angewandte Chemie“ veröffentlichten Ergebnisse zeigen einen einfachen Zugang zu Strukturinformationen, wenn klassische Analysemethoden versagen.

Das Team von Professor Burkhard Luy vom KIT und Juniorprofessor Stefan F. Kirsch von der TUM hat erstmals gezeigt, dass bestimmte NMR-Parameter, sogenannte dipolare Restkopplungen (RDCs), entscheidend zur Aufklärung des grundlegenden Aufbaus von chemischen Verbindungen beitragen können, wenn traditionelle Methoden versagen. Hierzu betteten sie die Moleküle, aus denen die Verbindung besteht, in ein Gel ein, das ihre Beweglichkeit leicht einschränkt. Durch Streckung des Gels lassen sich die Moleküle in einer Vorzugsrichtung anordnen. Während sich in Lösung die dipolaren Restkopplungen herausmitteln, sind sie in solchen teilweise orientierten Proben messbar und liefern schließlich Daten, die sich zu einem Abbild des Moleküls zusammensetzen lassen.

Die Forscher überprüften diesen neuen Ansatz zur Strukturaufklärung, indem sie ein Molekül untersuchten, dessen atomare Zusammensetzung zwar bekannt war, nicht jedoch, wie genau die einzelnen Atome des Moleküls miteinander verknüpft sind. Das Molekül war über eine einzigartige Reaktion erhalten worden, so dass es keine Präzedenzfälle zu seiner Struktur gab; klassische Analysemethoden versagten aufgrund der Kompaktheit des Moleküls. Die Strukturaufklärung gelang in diesem konkreten Fall einzig durch dipolare Restkopplungen, so dass mit dem gewonnenen Wissen Rückschlüsse zur Bildung des Moleküls möglich waren, über die man vorher nur spekulieren konnte.

Technische Universität München Corporate Communications Center 80290 München www.tum.de

Name	Funktion	Telefon	E-Mail
Dr. Ulrich Marsch	Sprecher des Präsidenten	+49 89 289 22778	marsch@zv.tum.de
Dr. Andreas Battenberg	PR-Referent Campus Garching	+49 89 289 10510	battenberg@zv.tum.de

„Nicht alle Strukturen werden sich zukünftig auf diesem Wege analysieren lassen“, so die Wissenschaftler Luy und Kirsch. „Es wird weiterhin Moleküle geben, die sich ihrer Enträtselung trotz aller Bemühungen und modernster Methoden hartnäckig verweigern werden. Die Anwendung der neuen Methode bietet jedoch ein weiteres Werkzeug, um die strukturellen Rätsel der Natur zu entschlüsseln.“

Die Forschungsarbeit wurde unterstützt aus Mitteln der Deutschen Forschungsgemeinschaft (Heisenberg-Programm, Forschergruppe FOR 934) und dem Fonds der Chemischen Industrie. Die Messungen haben die Wissenschaftler auf Geräten des Bayerischen NMR-Zentrums durchgeführt.

Publikation:

Grit Kummerlöwe, Benedikt Crone; Manuel Kretschmer, Stefan F. Kirsch und Burkhard Luy: Dipolare Restkopplungen als effektives Instrument der Konstitutionsanalyse: die unerwartete Bildung tricyclischer Verbindungen. *Angewandte Chemie*, online 17. Februar 2011.

DOI: 10.1002/ange.2010007305.

Link: <http://onlinelibrary.wiley.com/journal/10.1002/%28ISSN%291521-3773/earlyview>

Kontakt:

Jr. Prof. Dr. Stefan F. Kirsch

Technische Universität München

Department Chemie und Zentralinstitut für Katalyseforschung

Lichtenbergstr. 4 85748 Garching, Germany

Tel.: +49 89 289 13229 – Fax: +49 89 289 13315

E-Mail: Stefan.Kirsch@ch.tum.de – Internet: <http://www.sfk.ch.tum.de>

Die **Technische Universität München (TUM)** ist mit rund 460 Professorinnen und Professoren, 7.500 Mitarbeiterinnen und Mitarbeitern (einschließlich Klinikum rechts der Isar) und 26.000 Studierenden eine der führenden technischen Universitäten Europas. Ihre Schwerpunktfelder sind die Ingenieurwissenschaften, Naturwissenschaften, Lebenswissenschaften, Medizin und Wirtschaftswissenschaften. Nach zahlreichen Auszeichnungen wurde sie 2006 vom Wissenschaftsrat und der Deutschen Forschungsgemeinschaft zur Exzellenzuniversität gewählt. Das weltweite Netzwerk der TUM umfasst auch eine Dependence in Singapur. Die TUM ist dem Leitbild einer unternehmerischen Universität verpflichtet.

Technische Universität München Corporate Communications Center 80290 München www.tum.de

Name	Funktion	Telefon	E-Mail
Dr. Ulrich Marsch	Sprecher des Präsidenten	+49 89 289 22778	marsch@zv.tum.de
Dr. Andreas Battenberg	PR-Referent Campus Garching	+49 89 289 10510	battenberg@zv.tum.de