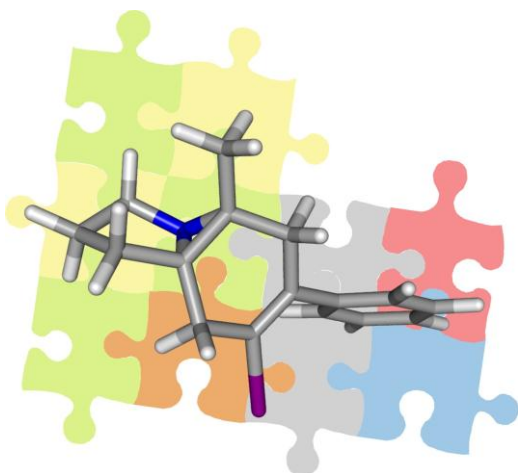


Neue Methode zur Enträtzelung molekularer Strukturen

Wissenschaftler des Karlsruher Instituts für Technologie und der TU München erhalten durch die Messung dipolarer Restkopplungen ein Bild des Moleküls



Puzzle gelöst: Mittels dipolarer Restkopplungen lassen sich Strukturen organischer Moleküle nachweisen. (Grafik: Grit Kummerlöwe und R. Oehme)

Chemiker des Karlsruher Institut für Technologie (KIT) und der Technischen Universität München (TUM) 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 dipo-

Monika Landgraf
Pressesprecherin (komm.)

Kaiserstraße 12
76131 Karlsruhe
Tel.: +49 721 608-47414
Fax: +49 721 608-43658

laren 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.

„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.

Literatur:

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*, 2011

DOI 10.1002/ange.2010007305 (für *Angewandte Chemie*)

DOI 10.1002/anie.2010007305 (für *Angewandte Chemie - International Edition*)

Das Karlsruher Institut für Technologie (KIT) ist eine Körperschaft des öffentlichen Rechts und staatliche Einrichtung des Landes Baden-Württemberg. Es nimmt sowohl die Mission einer Universität als auch die Mission eines nationalen Forschungszentrums in der Helmholtz-Gemeinschaft wahr. Das KIT verfolgt seine Aufgaben im Wissensdreieck Forschung – Lehre – Innovation.

Diese Presseinformation ist im Internet abrufbar unter: www.kit.edu