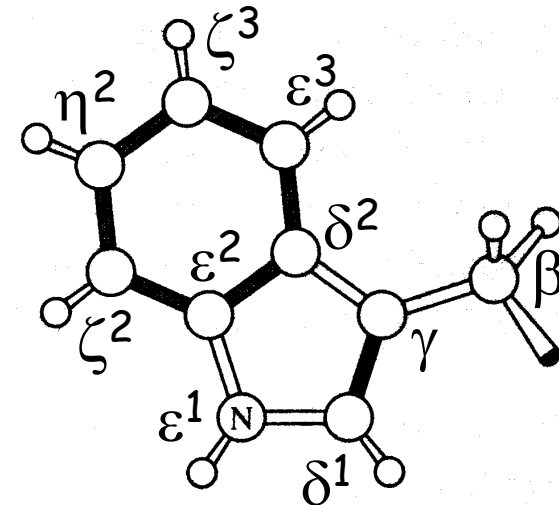
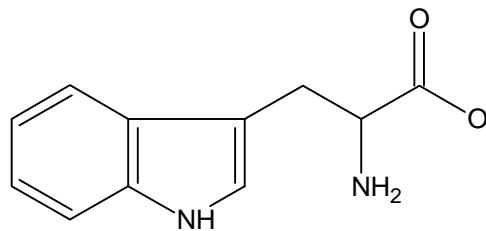
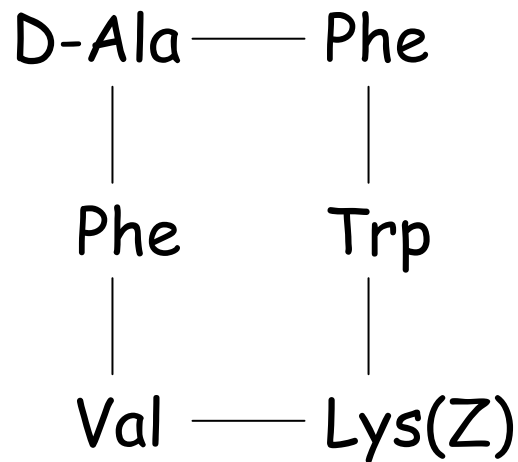
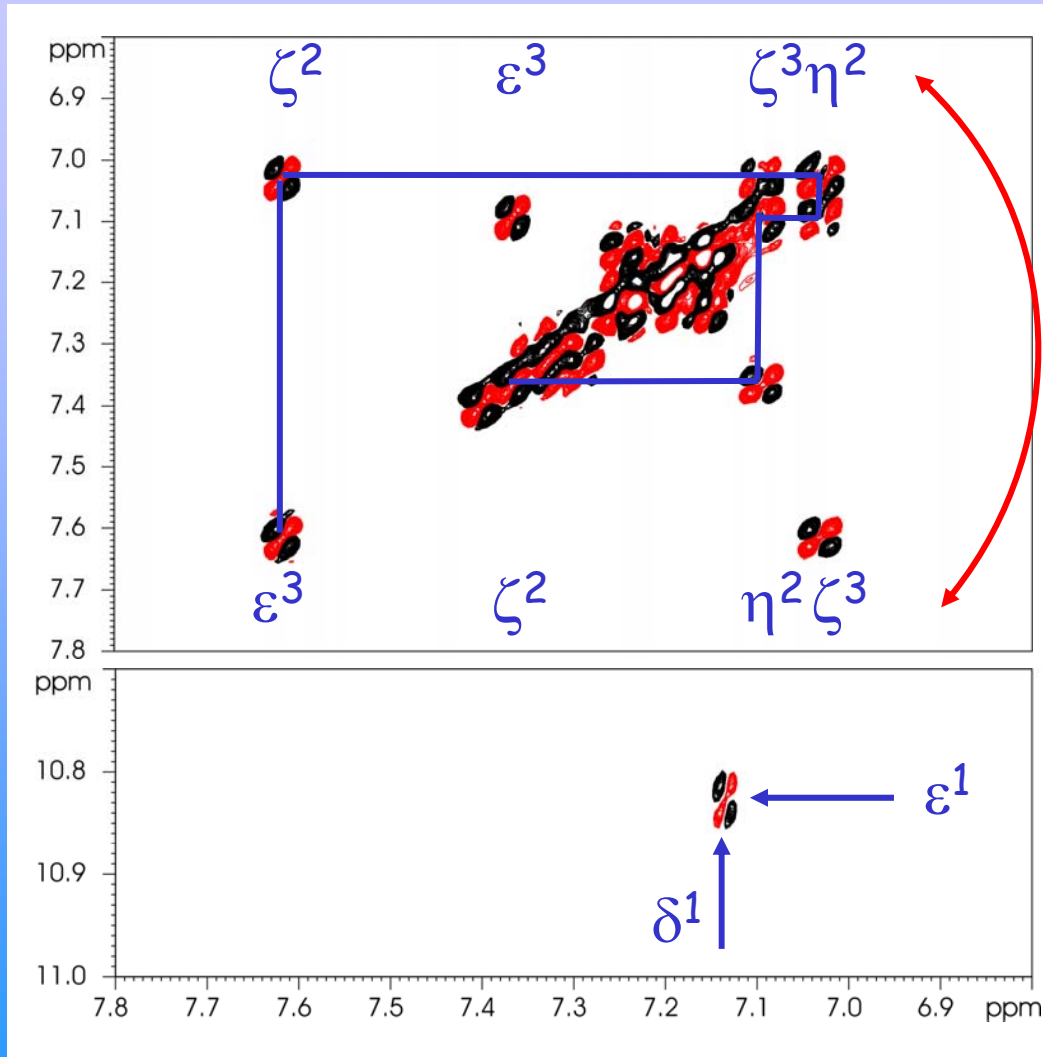


„Mehrdimensionale NMR-Spektroskopie-
Grundlagen und Anwendungen in der Strukturaufklärung“
Lösungen zu Übung VI

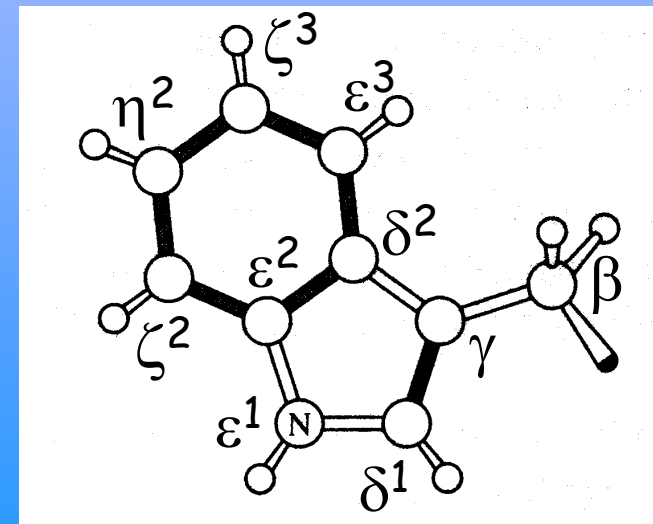
Ordnen Sie die Resonanzen des Tryptophanrings im
cyclischen Hexapeptid „retro-VDA-008“ (mit der
Sequenz $\text{cyclo-(-D-Ala-Phe-Trp-Lys(Z)-Val-Phe-)}$) anhand
von DQF-COSY, HMQC und HMBC zu



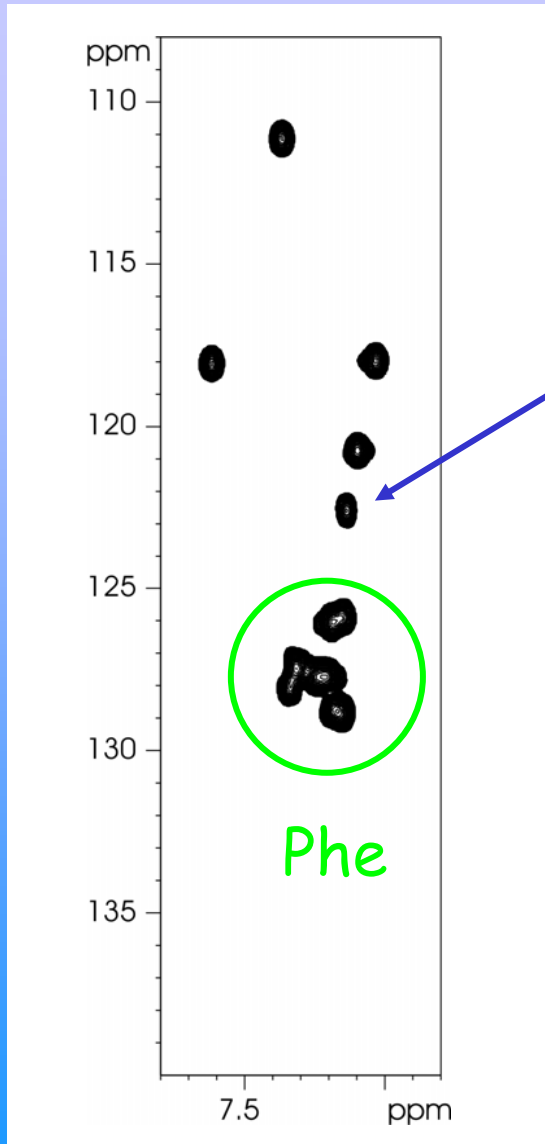
„Mehrdimensionale NMR-Spektroskopie-
Grundlagen und Anwendungen in der Strukturaufklärung“
Lösungen zu Übung VI



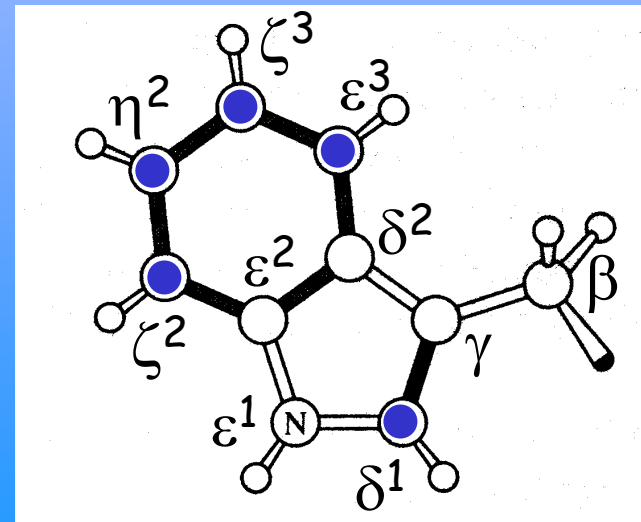
Zwei Möglichkeiten !!



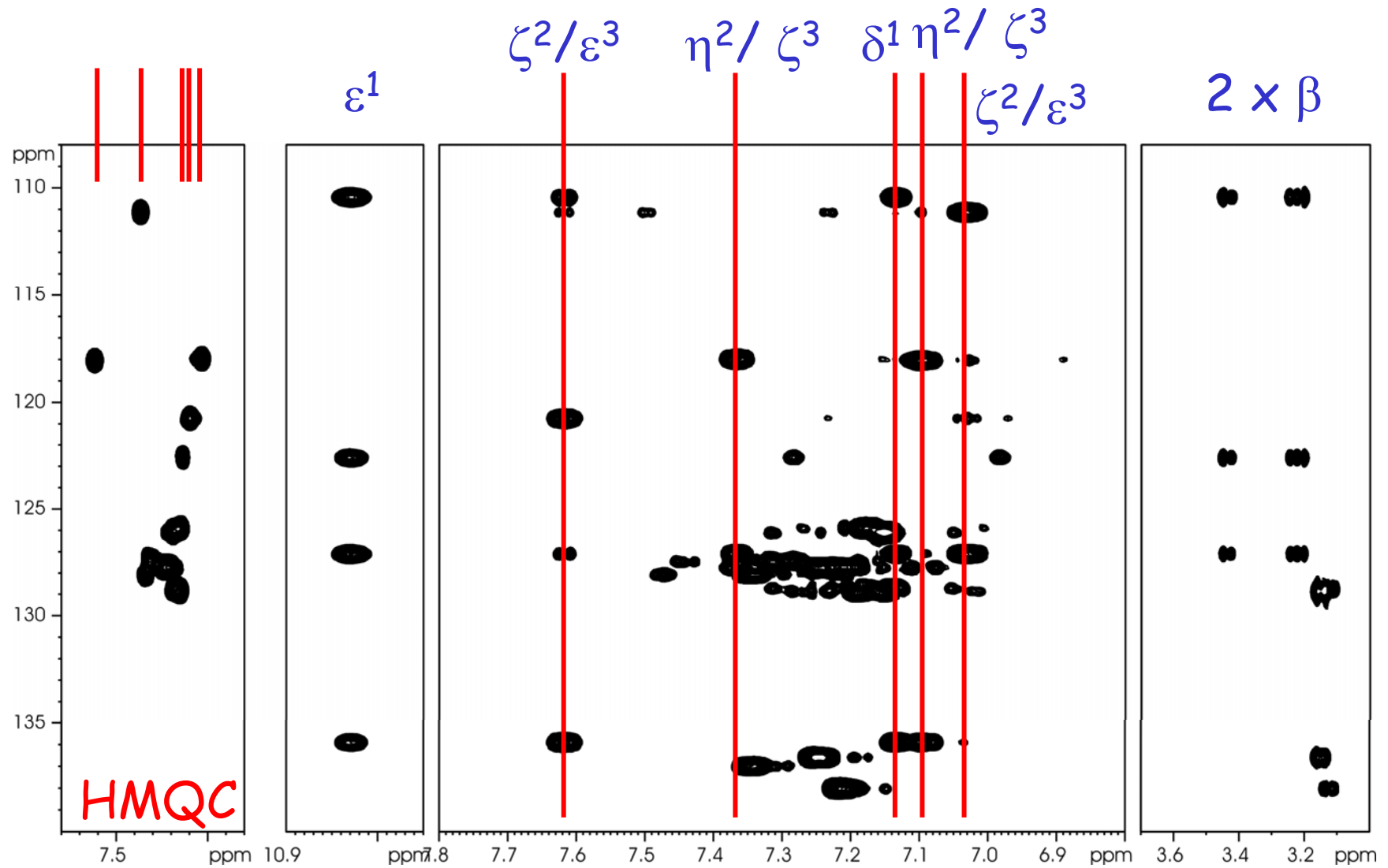
„Mehrdimensionale NMR-Spektroskopie-
Grundlagen und Anwendungen in der Strukturaufklärung“
Lösungen zu Übung VI



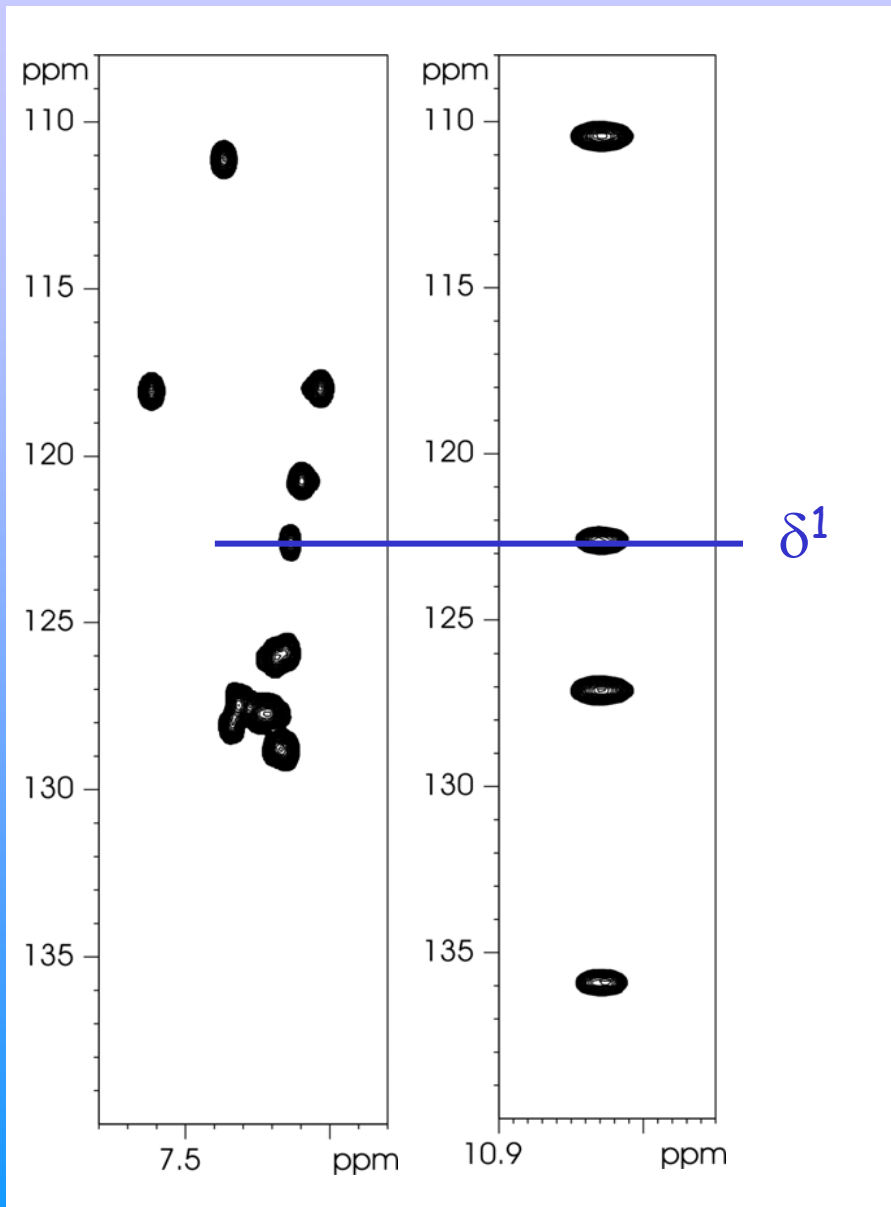
Wir haben 5 protonentragende
Kohlenstoffe im Trp-Ring,
 δ^1 können wir aus dem COSY
identifizieren



„Mehrdimensionale NMR-Spektroskopie-
Grundlagen und Anwendungen in der Strukturaufklärung“
Lösungen zu Übung VI

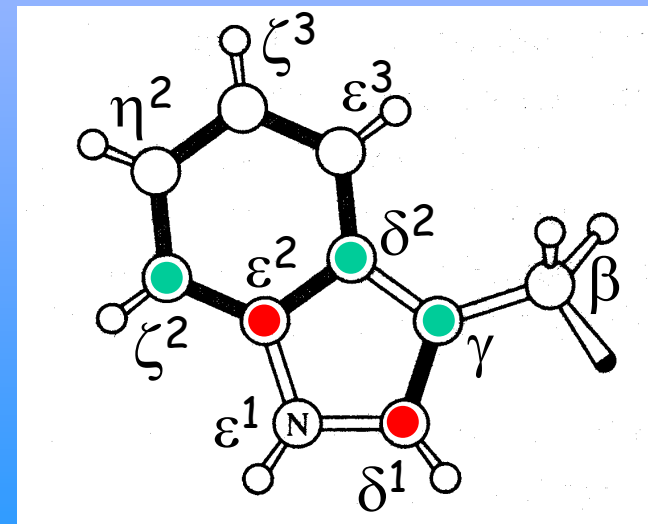


„Mehrdimensionale NMR-Spektroskopie-
Grundlagen und Anwendungen in der Strukturaufklärung“
Lösungen zu Übung VI

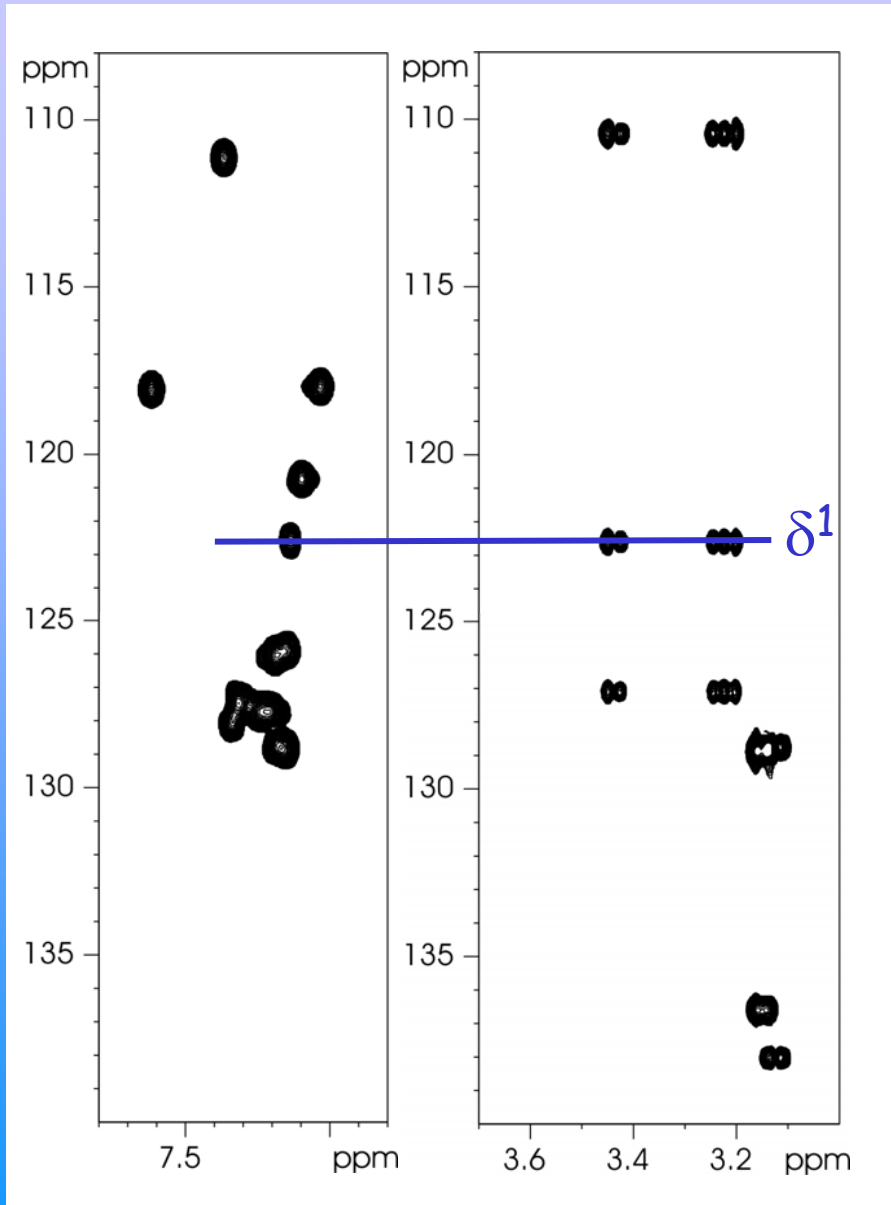


Vom Indol ε^1 aus
können wir bis zu 5
Signale erwarten, 2
via 2J , 3 via 3J

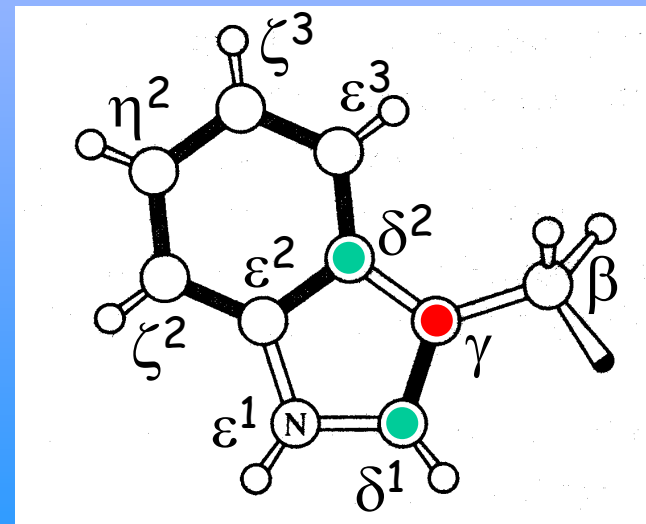
ζ^2 (hat Proton !) ist
nicht dabei



„Mehrdimensionale NMR-Spektroskopie-
Grundlagen und Anwendungen in der Strukturaufklärung“
Lösungen zu Übung VI

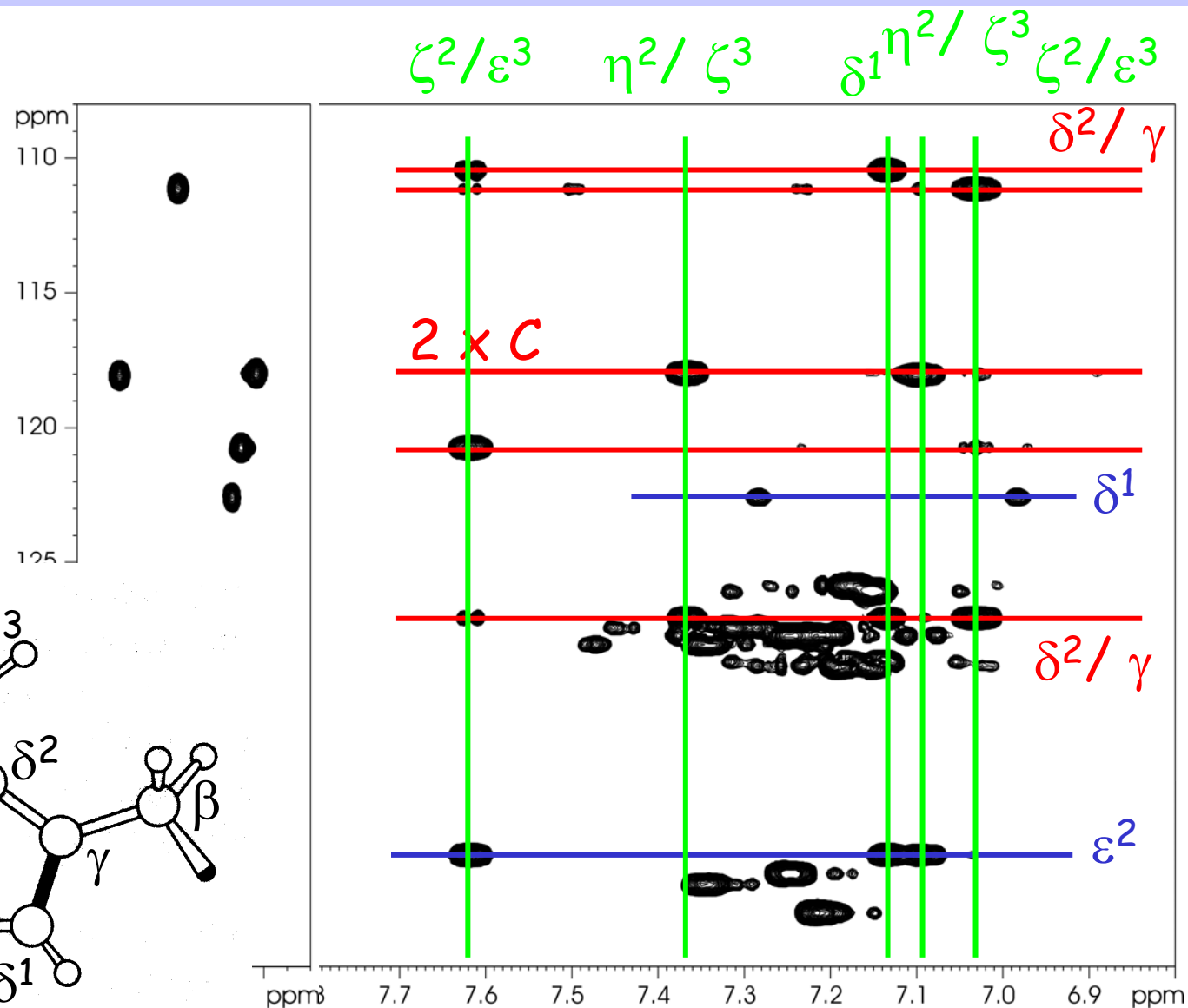
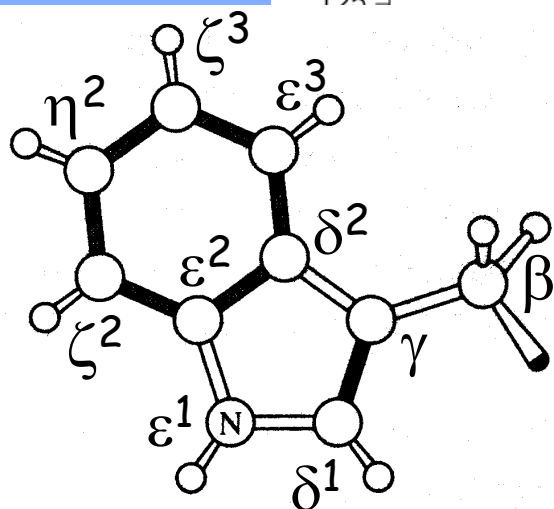


Vom β aus können wir
bis zu 3 Signale
erwarten, 1 via 2J , 2
via 3J
 ϵ^2 ist nicht dabei !!

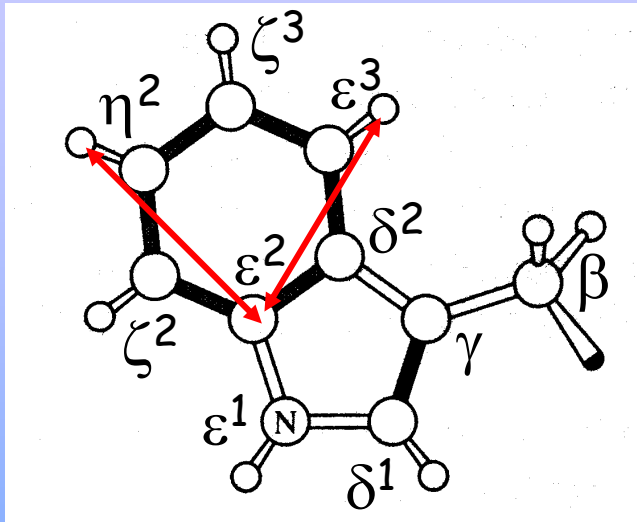


„Mehrdimensionale NMR-Spektroskopie-
Grundlagen und Anwendungen in der Strukturaufklärung“
Lösungen zu Übung VI

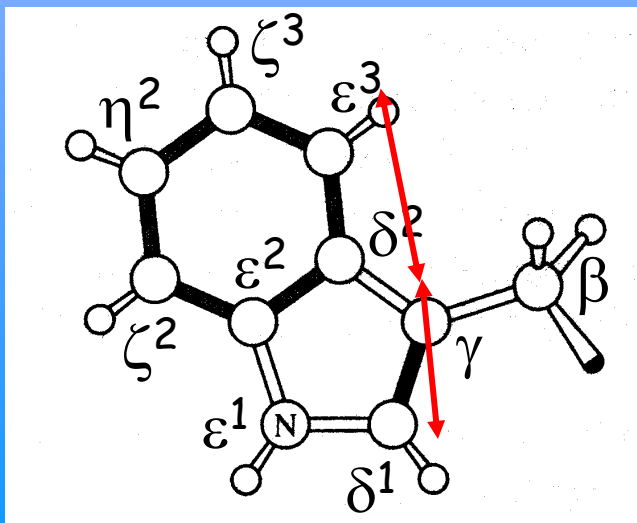
Damit geht
es in den
zentralen
Bereich des
HMBC



„Mehrdimensionale NMR-Spektroskopie-
Grundlagen und Anwendungen in der Strukturaufklärung“
Lösungen zu Übung VI

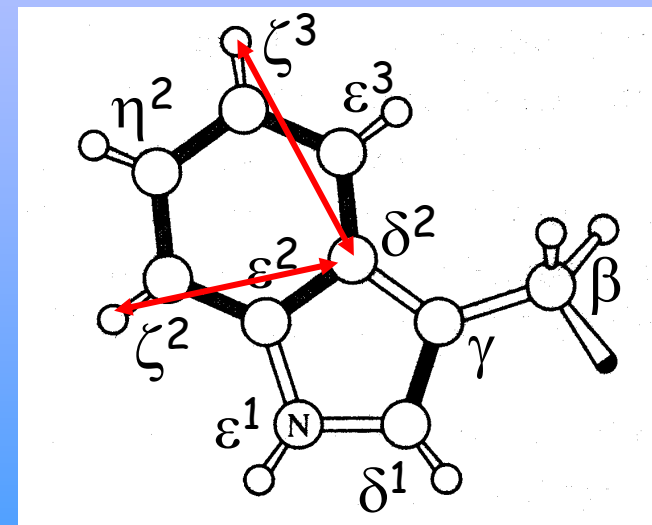


und von ζ^3 und ζ^2 zu δ^2



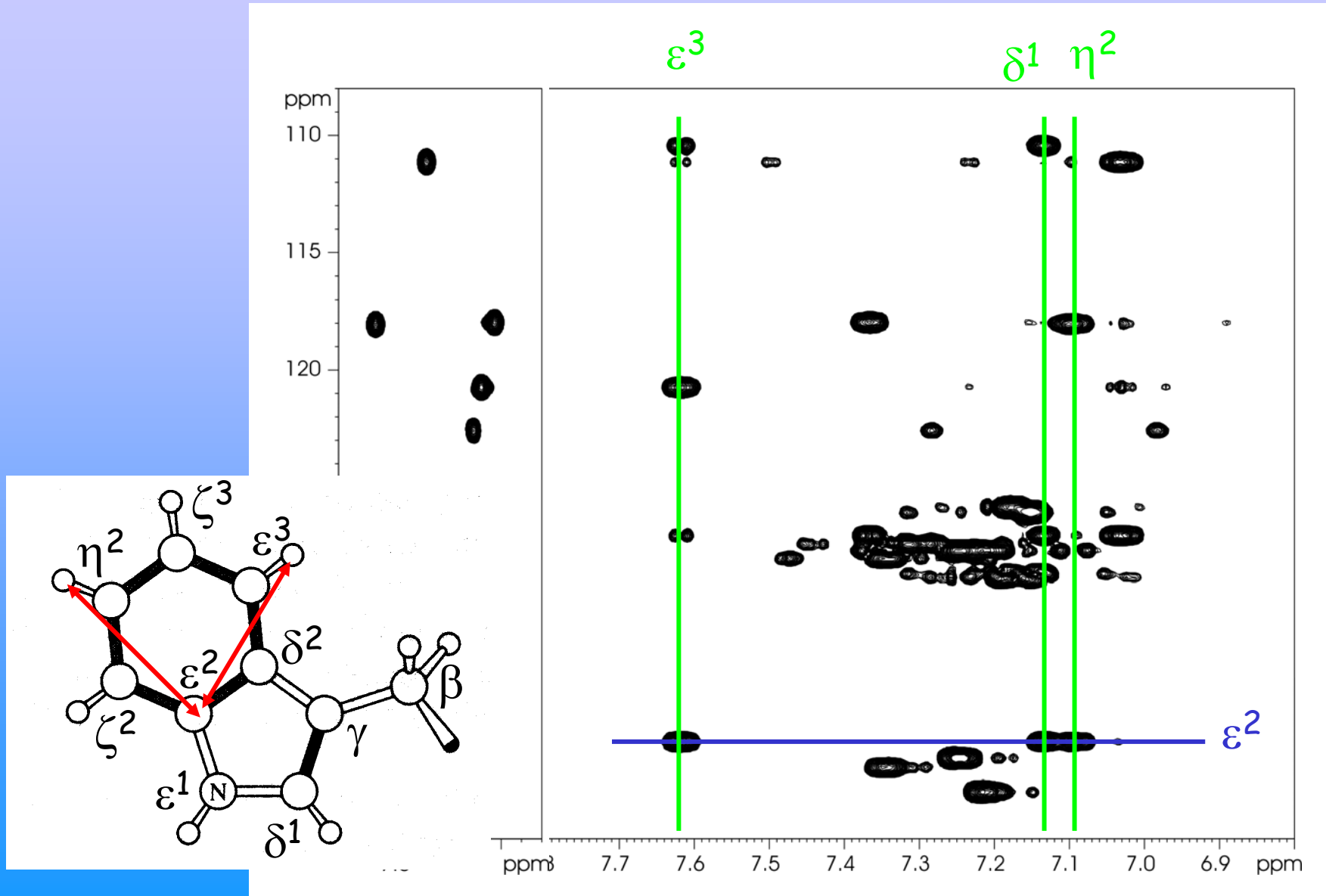
Wir arbeiten mit der Annahme
das ${}^3J > {}^2J$

Dann ergeben sich Korrelationen
von η^2 und ε^3 zu ε^2

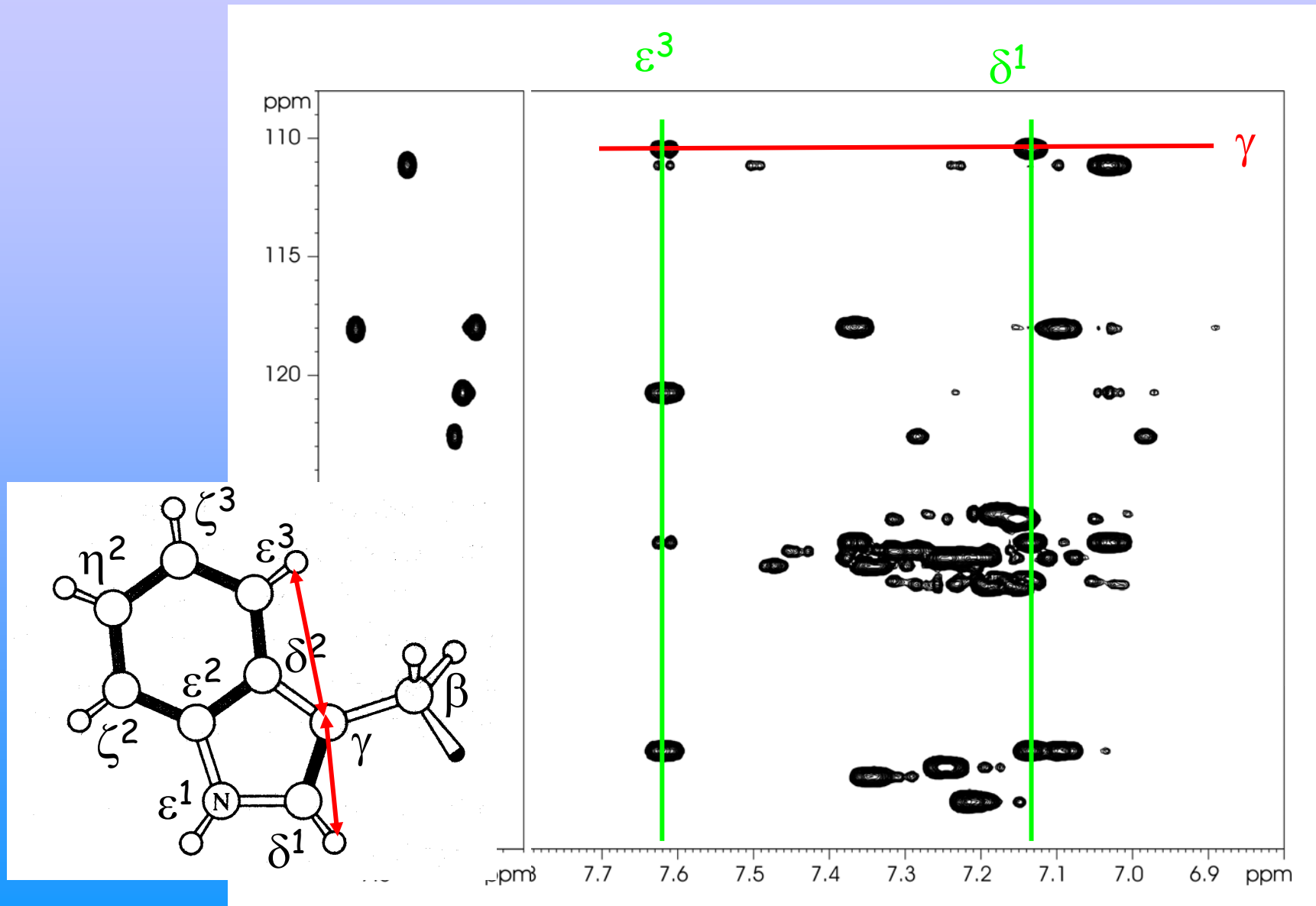


Zu γ erwartet man nur
Korrelationen von δ^1 und ε^3

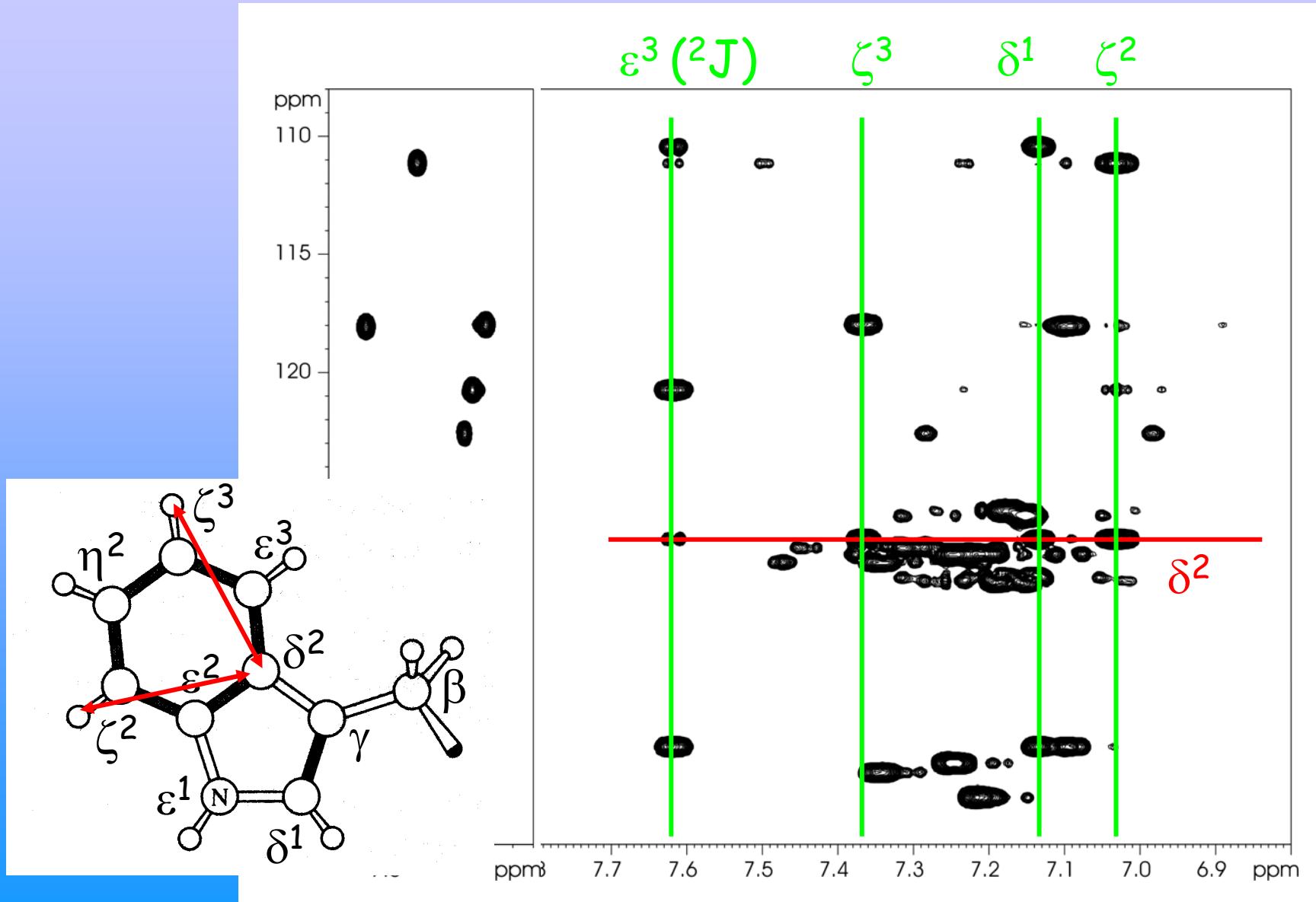
„Mehrdimensionale NMR-Spektroskopie-
 Grundlagen und Anwendungen in der Strukturaufklärung“
 Lösungen zu Übung VI



„Mehrdimensionale NMR-Spektroskopie-
Grundlagen und Anwendungen in der Strukturaufklärung“
Lösungen zu Übung VI



„Mehrdimensionale NMR-Spektroskopie-
Grundlagen und Anwendungen in der Strukturaufklärung“
Lösungen zu Übung VI



„Mehrdimensionale NMR-Spektroskopie-
 Grundlagen und Anwendungen in der Strukturaufklärung“
 Lösungen zu Übung VI

