

Természetes származékok *in silico* kiroptikai és NMR vizsgálata

In silico chiroptical and NMR investigation of natural products

MÁNDI Attila¹, RIMÓCZI Aliz¹, BARTA Roland Albert¹, KIRÁLY Sándor Balázs¹, KURTÁN Tibor¹

¹ Debreceni Egyetem Szerves Kémiai Tanszék, 4032 Debrecen, Egyetem tér 1., Tel: +36-52-512-900/22256, mandi.attila@science.unideb.hu, <https://kemia.unideb.hu/>

ABSTRACT

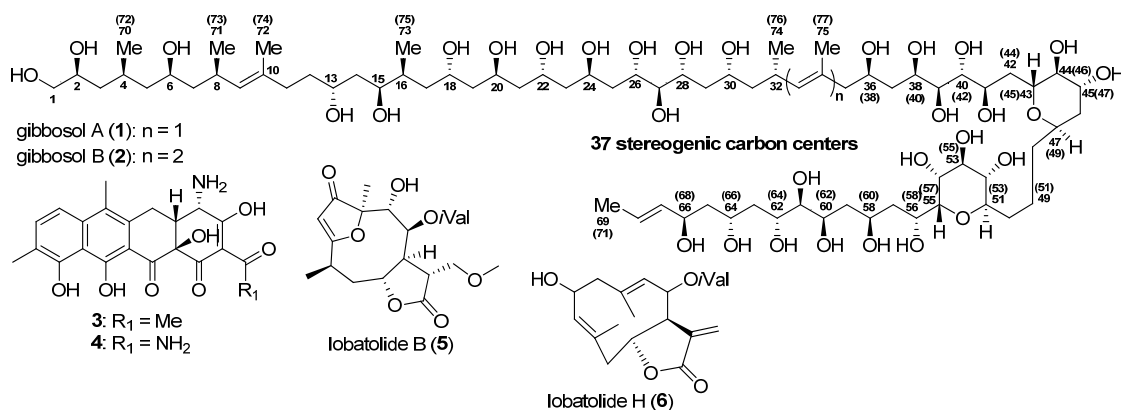
Determination of the relative and absolute configuration of isolated natural derivatives is not trivial in many cases despite the many methods available even today. Therefore, misassignments still occur in the literature, and for a more certain assignment, it is advisable to use a combination of multiple methods. In my presentation, I would like to present examples where the structure identification was achieved by the combined application of TDDFT ECD/OR and DFT-NMR methods. For this, in the case of NMR, in addition to classical chemical shift calculations, parameter development was also performed.

Keywords: chiroptical spectroscopy, ECD, VCD, NMR, calculations, structure determination

ÖSSZEFOGLALÓ

Az izolált természetes származékok relatív és abszolút konfigurációjának meghatározása a napjainkban rendelkezésre álló számos módszer ellenére sem triviális sok esetben. Így máig előfordulnak az irodalomban félreasszignálások, a biztosabb hozzárendeléshez pedig célszerű több módszer kombinációját alkalmazni. Előadásomban olyan példákat szeretnék bemutatni, ahol TDDFT ECD/OR és DFT-NMR módszerek együttes alkalmazásával sikerült a szerkezetazonosítás. Ehhez az NMR esetén a klasszikus kémiai eltolódás számítások mellett paraméter-fejlesztést is végeztünk.

Kulcsszavak: kiroptikai spektroszkópia, ECD, VCD, NMR, számítás, szerkezet-meghatározás



Angew. Chem. Int. Ed. **2020**, *59*, 13028; *Angew. Chem. Int. Ed.* **2023**, *62*, e202306437; *Pharmaceutics* **2021**, *13*, 2088; *Int. J. Mol. Sci.* **2023**, *24*, 5841.