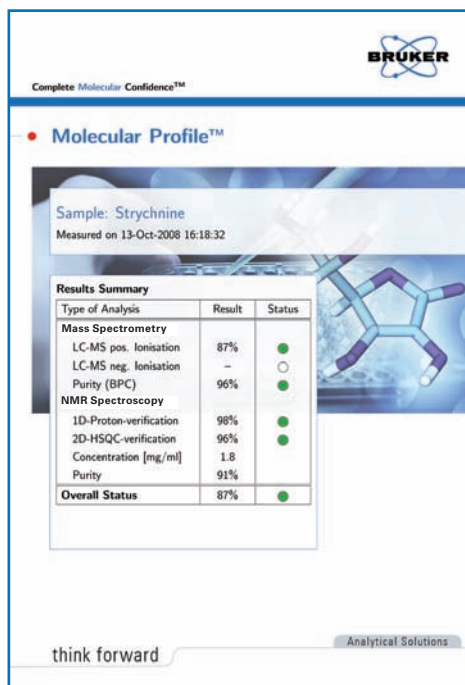




## ● Complete Molecular Confidence



### Kontakt:

Prof. Dr. U. Siehl  
Institut für Organische Chemie I  
Albert Einstein Allee 11, office: O26 4405  
Universitaet Ulm  
D-89069 Ulm  
Phone +49-(0)731-502-2800

Anmeldungen und eventuelle Rückfragen an  
[ullrich.siehl@uni-ulm.de](mailto:ullrich.siehl@uni-ulm.de)

### Bruker Corporation



## Seminar: Complete Molecular Confidence

- Donnerstag, 23. Juli, 2009  
Universität Ulm, Seminarraum O26/4309

**Das Institut für Organische Chemie I der Universität Ulm in Zusammenarbeit mit Bruker lädt ein zu einem Seminar: "Complete Molecular Confidence" - Aktuelle Aspekte der instrumentellen Analytik / Spektroskopie.**

Experten der Firma Bruker aus verschiedenen Anwendungsbereichen der instrumentellen Analytik stellen neue aktuelle Entwicklungen zur Untersuchung kleiner Moleküle vor.

Herr Dr. Thiele wird über den Einsatz von ESI-TOF- und ESI-Q-TOF-Massenspektrometern (MS-Geräte) zur Strukturverifikation und Reinheitsbestimmung von Substanzen berichten. Diese Generation der MS-Geräte liefert mit der hohen Massengenauigkeit der MS- und MS/MS-Daten eine exakte Molekulargewichtsbestimmung und mit dem hochaufgelösten Isotopenprofil sowohl für MS- als auch MS/MS-Spektren weitere Informationsdimensionen für eine exakte Summenformelbestimmung.

Herr Dr. Kühn spricht über die Qualitätskontrolle von Substanzbibliotheken mittels NMR in der pharmazeutischen Industrie. Die Substanzen dieser Bibliotheken bilden den Grundstock neuer Medikamentenentwicklungen, beispielsweise bei der Durchführung von Bindungsstudien an potentiellen Zielproteinen. Hierbei sind Identität, Reinheit und Konzentration der untersuchten Verbindungen von größter Bedeutung.

Herr Dr. Kessler berichtet über eine Kombination von modernen NMR Experimenten und neueren Algorithmen, die eine weitgehende Automatisierung der NMR-Datenauswertung und die automatische Generierung von Strukturvorschlägen für unbekannte Verbindungen erlaubt.

Ein vollständig automatisiertes Analysesystem für die Einkristalldiffraktometrie stellt Herr Dr. Adam mit dem SMART X2S vor. Dieses Bench-Top Gerät erstellt dreidimensionale Strukturen von Einkristallen. Dabei kann erstmals auf tiefgehendes kristallographisches Wissen verzichtet werden und die Kristallstrukturanalyse wird so enorm vereinfacht, daß die Anlage im industriellen Bereich oder in der Lehre Einsatz finden kann.

Die Teilnahme ist kostenlos, eine Anmeldung ist erwünscht.

Wir freuen uns auf Ihr reges Interesse und eine interessante Veranstaltung mit vielfältigem Gedankenaustausch.

Prof. Dr. U. Siehl

Institut für Organische Chemie I

Universität Ulm

## • Programm

14:15	Begrüßung	Prof. Hans-Ullrich Siehl
14:30	Struktur-Verifikation von kleinen Molekülen durch Integration von Massenspektrometrie	Dr. Herbert Thiele
15:10	Qualitätskontrolle mit NMR: Strukturverifikation und quantitative Analyse	Dr. Till Kühn
15:50	Ein Blick in die Zukunft: Neue NMR SW Tools zur Strukturaufklärung von kleinen Molekülen	Dr. Pavel Kessler
16:30	Einkristallstrukturen auf Knopfdruck	Dr. Martin Adam
17:10	Diskussion & SW Vorführungen	

Anmeldungen und eventuelle Rückfragen an  
[ullrich.siehl@uni-ulm.de](mailto:ullrich.siehl@uni-ulm.de)

