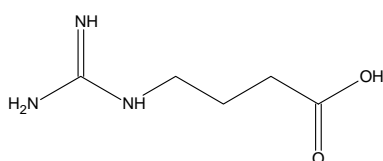


Determinación estructural RMN Ejercicio-1

Identificación de dos toxinas aisladas de unos hongos recolectados en china

De estos hongos, recientemente se han aislado e identificado dos aminoácidos (A y B) no estándar que les confieren una gran toxicidad, junto con ellos se aisló también un cierto contenido de la toxina γ -guanidinobutírico.



Las toxinas A y B tienen una gran toxicidad con un valor de LD₅₀ de 71 y 84 mg/Kg en ratón.

Datos disponibles:

- Fórmula molecular de **A** C₆H₉NO₃
- Fórmula molecular de **B** C₆H₉NO₂
- En los espectros de infrarrojo de A y B se observan entre otras una señal significativa a 2150 cm⁻¹, junto con las señales de carbonilo y del OH
- Se ha determinado que los carbonos con desplazamiento químico de 85 y 84.6 ppm tienen una constante de acoplamiento con el H directamente unido a ellos de unos 250 Hz.

Para su identificación se disponen de un amplio conjunto de espectros de RMN, en especial para el compuesto **A**. En base a los espectros que se adjuntan a continuación, indicar la estructura de **A** y **B**, justificando brevemente la asignación de los espectros de RMN.

Los espectros se han adquirido en un equipo de 500 MHz, utilizando DMSO-d₆ como disolvente en el caso del compuesto **A** y D₂O para el **B**.

	Compuesto A (DMSO-d ₆)		Compuesto B (D ₂ O)	
	δ 13C	δ 1H	δ 13C	δ 1H
1	173.9 s		175.9 s	
2	53.5	d 3.70 (dd, 7.3, 4.3)	55.6 d	3.84 (dd, 7.0, 5.7)
3	38.4 t	2.10 (ddd, 14.6, 7.9, 4.3) 2.00 (ddd, 14.6, 7.3, 4.9)	30.9 t	2.11 (m) 2.00 (m)
4	60.1 d	4.46 (dd, 7.9, 4.9)	16.1 t	2.38 (m)
5	85.0 s		84.6 s	
6	76.6 d	2.93 (d, 1.8)	72.5 d	2.40 (s)

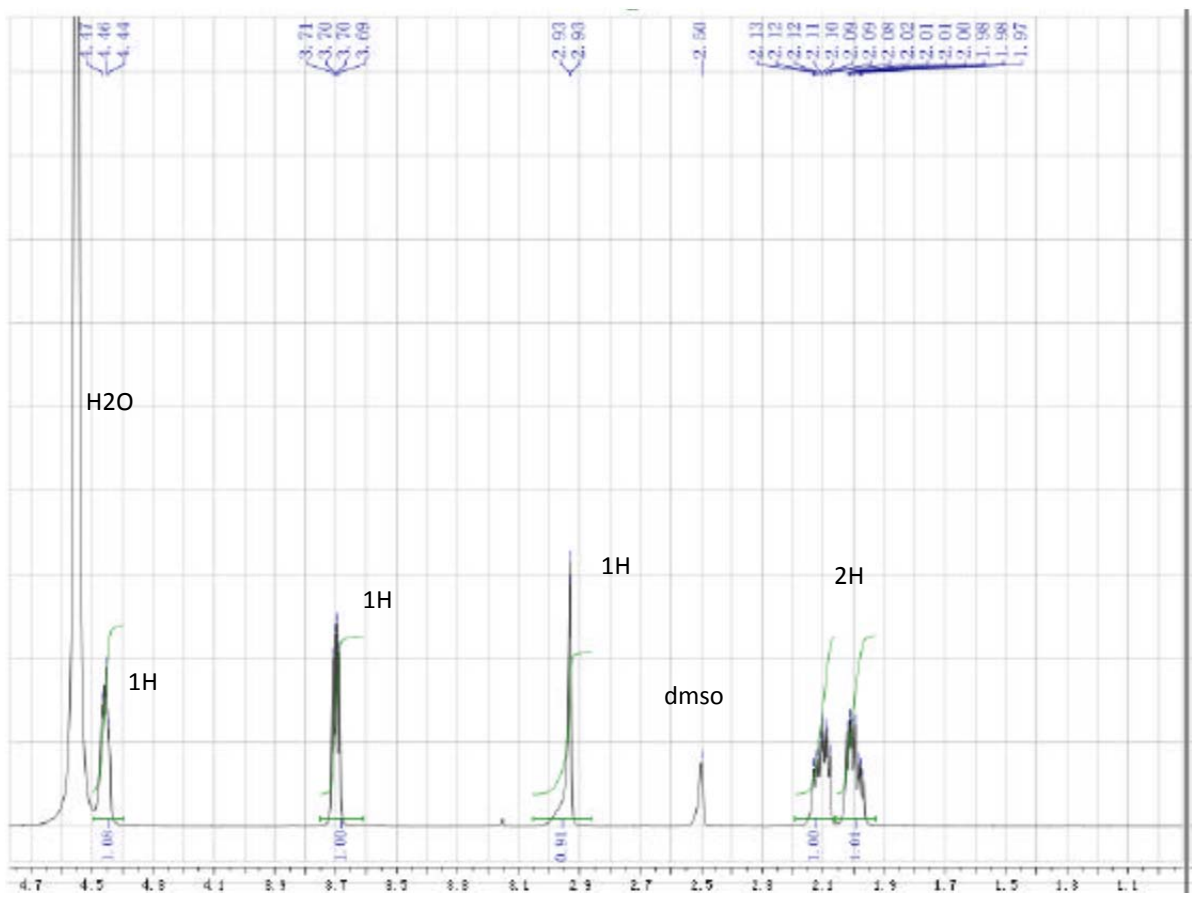


Figura-1 Compuesto A espectro 1H (dms0-d6)

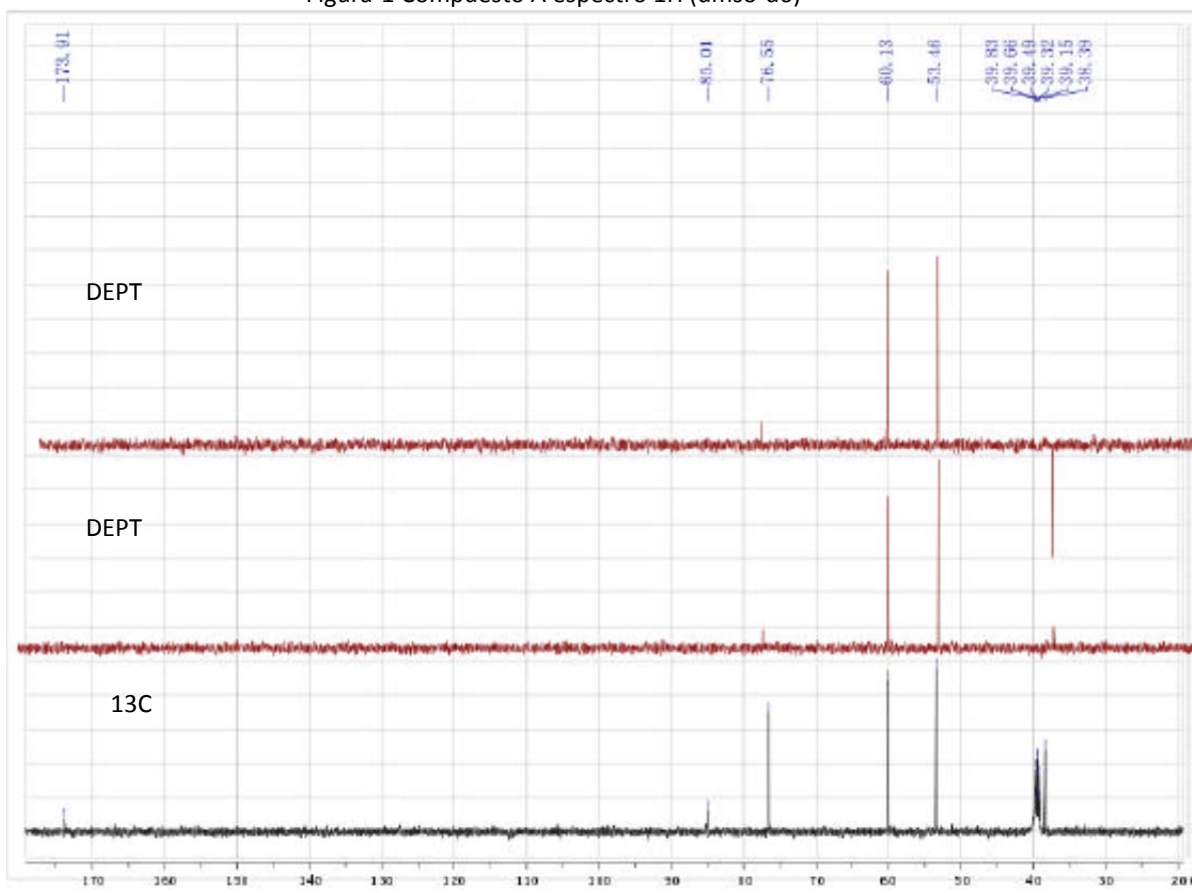


Figura-2 Compuesto A espectro 13C y DEPT (dms0-d6)

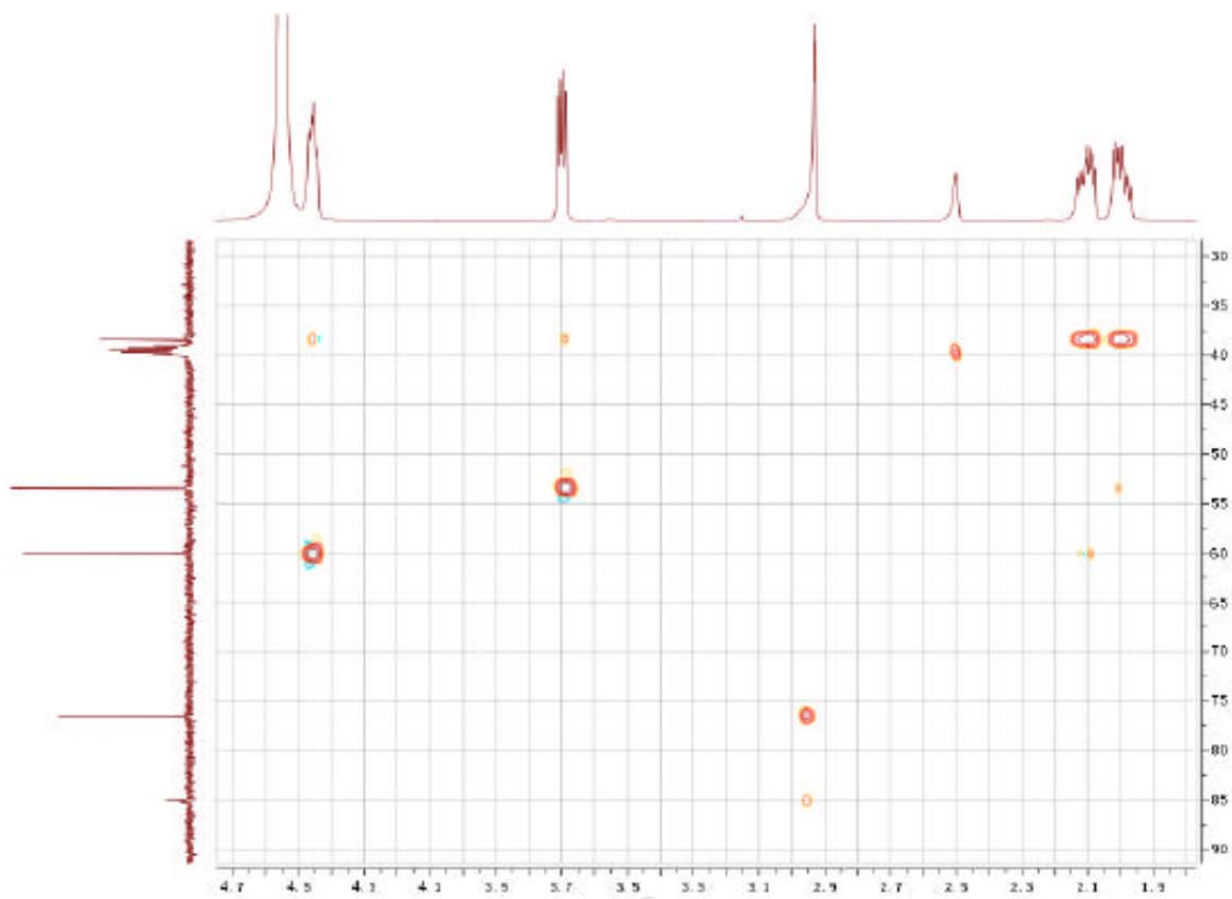


Figura-3 Compuesto A HSQC 1H-13C (dms0-d6)

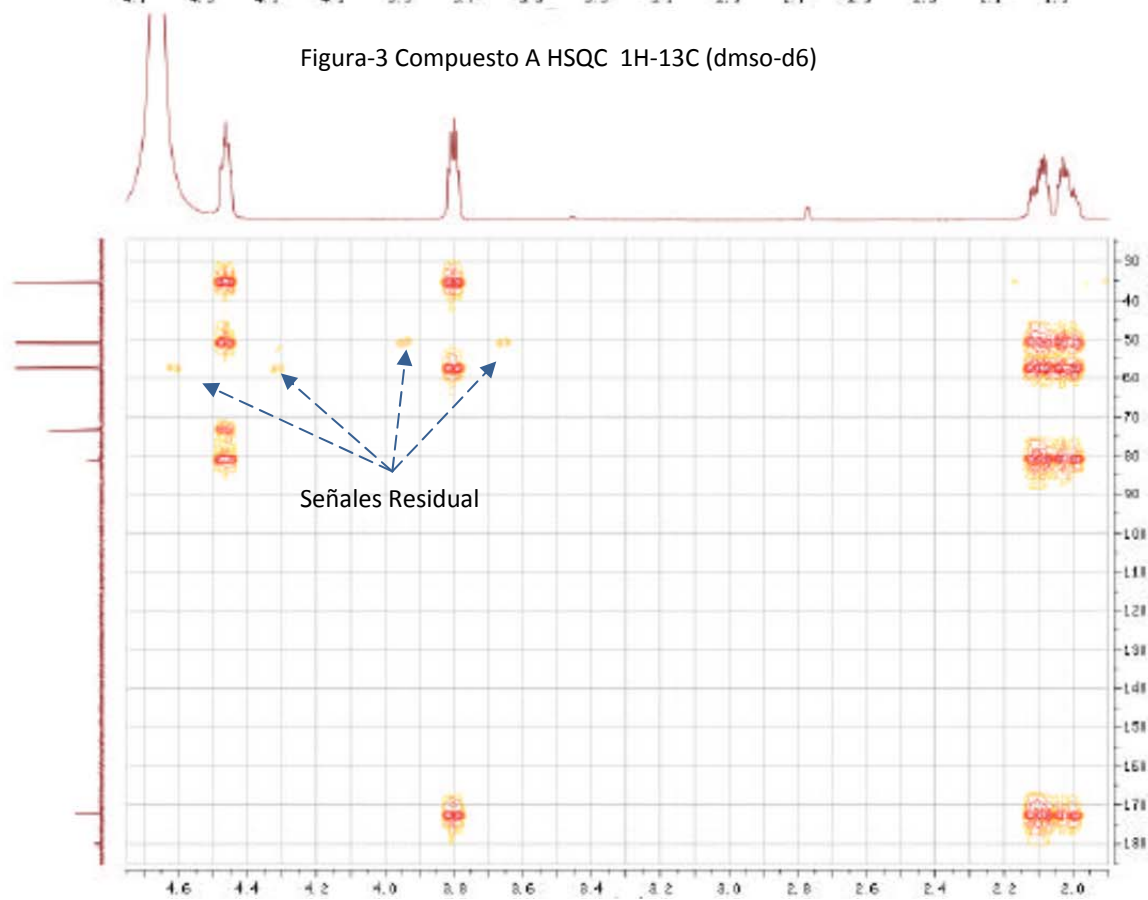


Figura-4 Compuesto A, HMBC 1H-13C (dms0-d6+D2O)

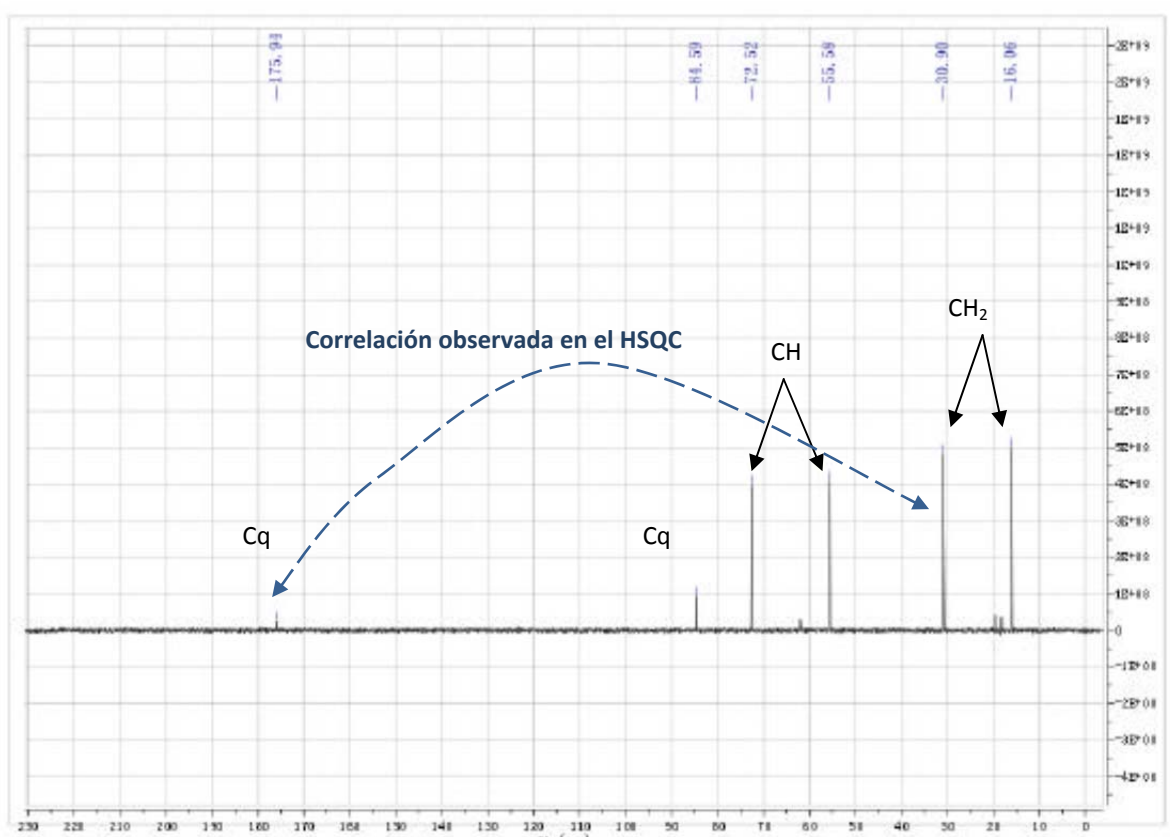


Figura-7 Compuesto B, ¹³C- (D₂O)