

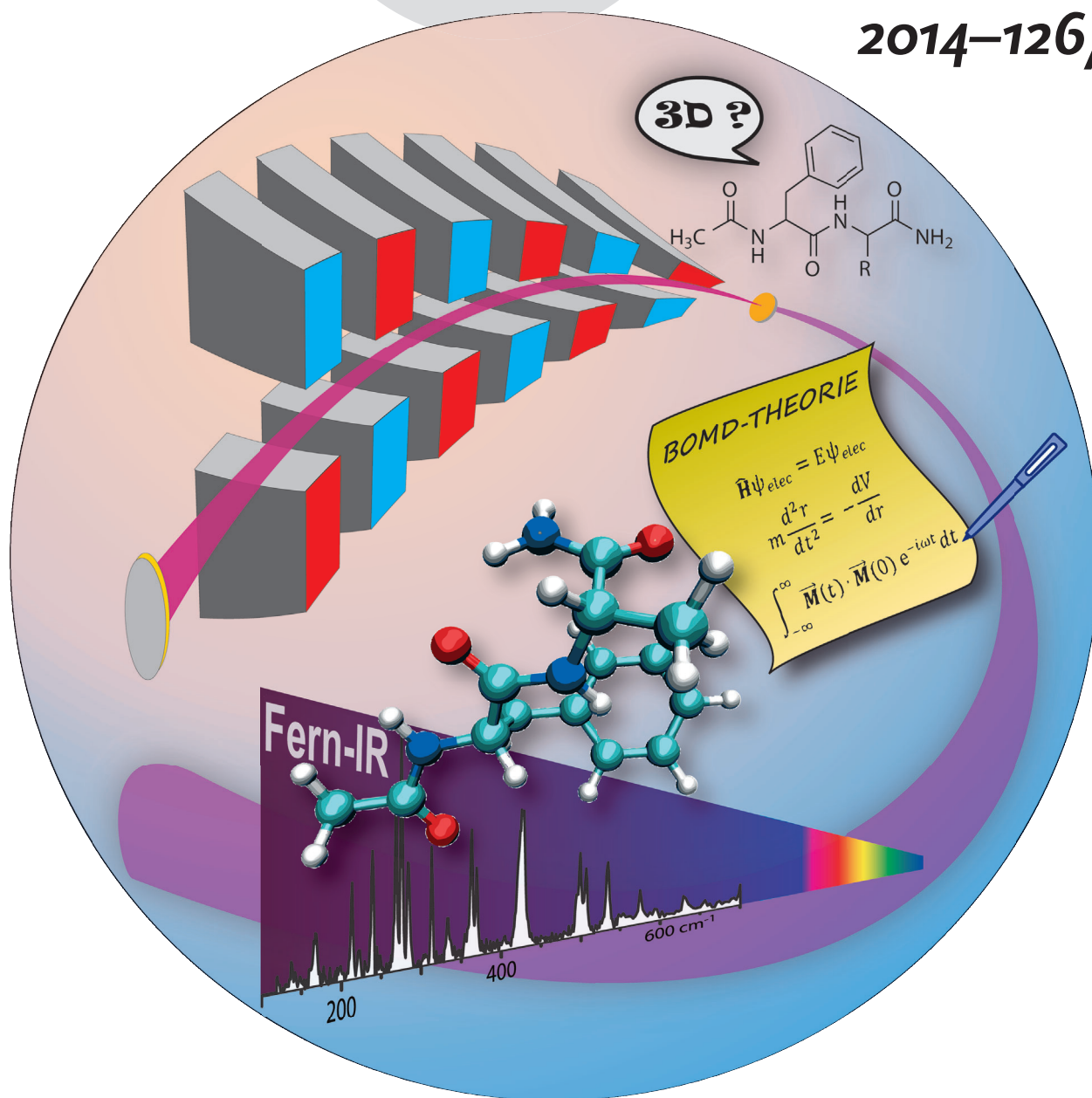
Angewandte Chemie

GDCh

Eine Zeitschrift der Gesellschaft Deutscher Chemiker

www.angewandte.de

2014–126/14



Weiche Schwingungsmoden ...

... sind typischerweise über das ganze Molekül delokalisiert. Ein Ferninfrarotspektrum soll deshalb detaillierte Informationen zur globalen Konformation von Peptiden enthalten. In ihrer Zuschrift auf S. 3737 ff. zeigen M.-P. Gaigeot, A. M. Rijs et al., dass konformationsselektive, spektroskopische Ferninfrarot-Experimente und Born-Oppenheimer-Moleküldynamik(BOMD)-Simulationen einen alternativen Ansatz liefern, mit dem diese Information entschlüsselt werden kann.

WILEY-VCH