

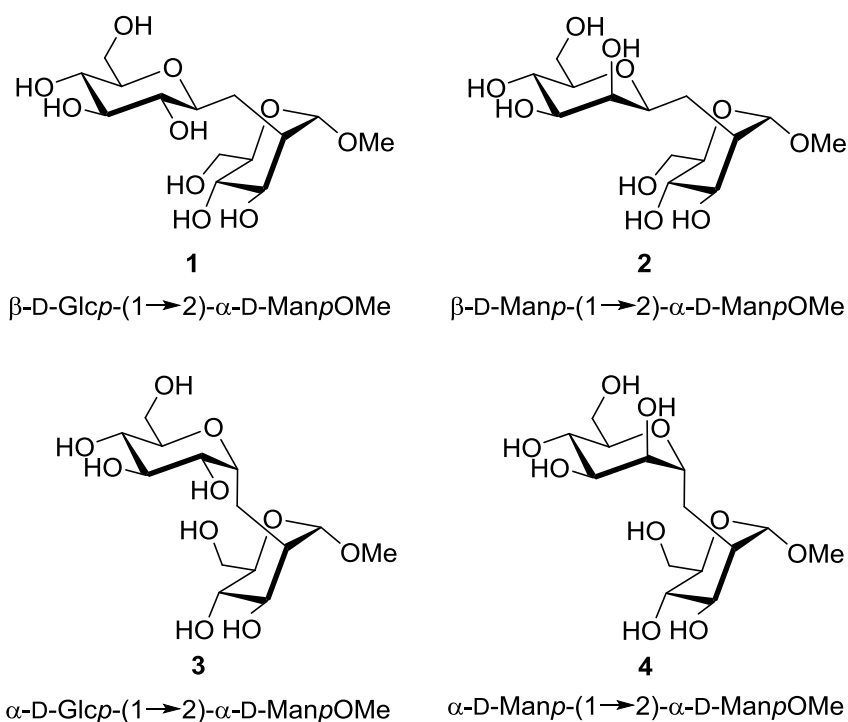
DIPLOMOVÁ PRÁCE

Studium konformace C-glykosidů pomocí NMR spektroskopie

Školitel: Ing. Radek Pohl, PhD., Ústav organické chemie a biochemie AV ČR

C-glykosidy jsou sloučeniny, ve kterých je kyslík glykosidické vazby nahrazen methylenovou skupinou. Takto modifikované glykosidy jsou pak výrazně stabilnější vůči chemické a enzymatické hydrolýze a vykazují řadu zajímavých biologických vlastností.

Cílem navrhované diplomové práce je studium konformace C-glykosidů **1-4** (obrázek 1) pomocí NMR spektroskopie a molekulového modelování.



Obrázek 1. Struktura studovaných C-glykosidů.

Nejprve budou získány dostupné NMR parametry (chemické posuny, spin-spinové interakční konstanty, Nukleární Overhauserův efekt - NOE) ve vodě jako izotropním prostředí. V dalším kroku bude NMR měření provedeno v přítomnosti kapalných krystalů kromolyu sodného, což umožní odečíst zbytkové dipolární interakce (residual dipolar couplings – RDC), které jsou citlivé na geometrii zkoumané sloučeniny. V rámci molekulového modelování budou optimalizovány geometrie všech 9 možných konformerů glykosidické vazby pro každý disacharid **1-4** a z těchto optimalizovaných geometrií budou zpětně vypočteny RDC a porovnány s experimentálními hodnotami. Optimalizované geometrie konformerů poslouží také pro výpočet NMR parametrů, zejména ^{13}C chemických posunů, a jejich následnou korelaci s experimentem.