

DOKTORSKÉ STUDIUM

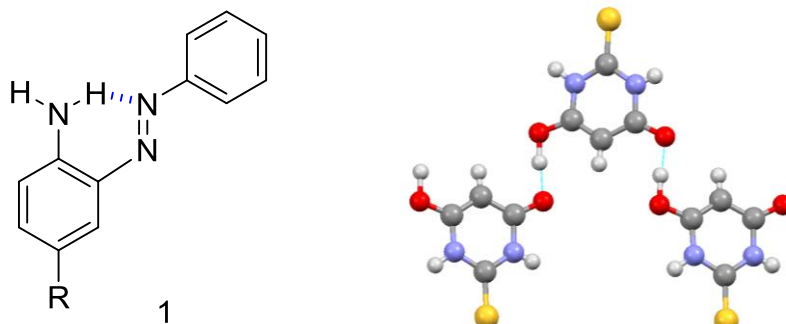
Studium vodíkových vazeb pomocí NMR spektroskopie

Školitel: RNDr. Martin Dračínský, PhD, Ústav organické chemie a biochemie AV ČR

Vodíkové vazby hrají mimořádně důležitou roli v interakcích mezi biomolekulami. NMR spektroskopie umožňuje získat jedinečné informace o struktuře a dynamice látek a v navrhované disertační práci bude využita k získání nových poznatků o vodíkových vazbách. V NMR spektrech je například pozorovatelná nepřímá spin-spinová interakce mezi atomy spojenými vodíkovou vazbou. Těchto interakcí "přes vodíkovou vazbu" se využívá při určování třídímenzionální struktury proteinů a nukleových kyselin. Dosud však nebyl prozkoumán vztah mezi velikostí této interakce a geometrií vodíkové vazby nebo vliv substituentů na velikost této interakce. Jiným zajímavým způsobem studování vodíkových vazeb je sledování vlivu izotopové substituce deuteriem na NMR parametry atomů vázaných vodíkovou vazbou. Náhrada vodíku za deuterium může způsobit změnu v geometrii vodíkové vazby a to se projeví i v NMR spektrech. Změny v geometrii vodíkové vazby může také způsobit změna teploty.

Cílem navrhované disertační práce je prohloubení znalostí o intra- i intermolekulárních vodíkových vazbách. Hlavní metodou bude NMR spektroskopie látek v roztoku i v pevném stavu a kvantově chemické výpočty. Například pro sérii látek s obecným vzorcem **1** bude experimentálně určen vliv substituentu R na chemické posuny atomů účastnících se vodíkové vazby, na velikost bariéry rotace kolem C–NH₂ vazby a také vliv izotopové substituce deuteriem na tyto parametry. Modelové látky budou připraveny buďto samotným doktorandem nebo ve spolupráci se syntetickými chemiky. V další fázi práce bude zkoumán vliv substituentu R na velikost spin-spinové interakce přes vodíkovou vazbu mezi dusíky v ¹⁵N značených látkách **1**. Dalšími studovanými systémy budou krystalické látky, například 2-thiobarbiturová kyselina **2**, v jejíž krystalové struktuře se vyskytují mimořádně krátké O–H...O vodíkové vazby. Pomocí NMR spektroskopie bude určen vliv izotopové substituce a teploty na strukturu této vodíkové vazby.

Experimentální výsledky budou doplněny teoretickými výpočty NMR parametrů a molekulovou dynamikou včetně pokročilých metod pro studium vlivu delokalizace vodíkových jader (nukleární kvantové efekty). Kombinace experimentálních a teoretických dat umožní formulovat nové zákonitosti o stabilitě, struktuře a dynamice vodíkových vazeb.



Struktura látky **1** s intramolekulární vodíkovou vazbou vyznačenou modře a intermolekulární vodíkové vazby v krystalové struktuře 2-thiobarbiturové kyseliny **2**.