

# Bakalářská práce:

## Vibrační optická aktivita 3-aminoquinuclidinu

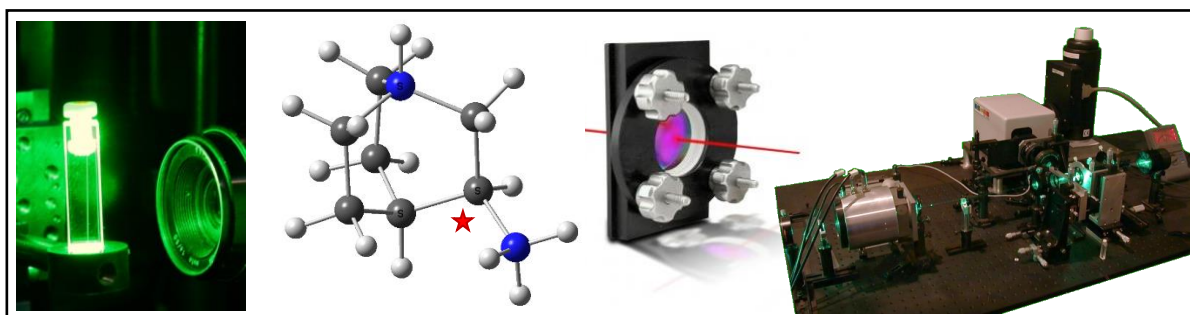
3-aminoquinuclidin (AQN) má široké využití jako důležitý **farmakofor** v mnoha různých modulátorech 5-HT<sub>3</sub> a 5-HT<sub>1A</sub> receptorů (iontové kanály zprostředkovávající depolarizaci a excitaci neuronů v centrálním i periferním nervovém systému), čidlech zobrazující neuronální aktivitu a látkách, které pomáhají obejít rezistenci vůči některým lékům proti rakovině. AQN je **chirální** molekula, tj. není ztotožnitelná se svým zrcadlovým obrazem (podobně jako naše levá a pravá ruka). Dvě molekuly, které se liší pouze svoji chiralitou, nazýváme enantiomery. Informace o konkrétní chiralitě a enantiomerní čistotě je pak klíčová pro využití AQN v syntéze medikamentů.

Pro výzkum a charakterizaci chemických sloučenin s farmakologickými účinky je využívána celá řada fyzikálních metod. Jednou z nich je vibrační spektroskopie, nedestruktivní metoda založená na interakci elektromagnetického záření se vzorkem, která umožňuje velice přesnou identifikaci studované látky (kvalitativní analýza) i stanovení množství této látky ve vzorku (kvantitativní analýza). Varianta vibrační spektroskopie citlivá na chirální uspořádání studované látky se nazývá vibrační optická aktivita (VOA) a spadají pod ní dvě odlišné techniky – Ramanova optická aktivita (ROA) a vibrační cirkulární dichroismus (VCD).

Nezbytnou součástí kvalitativní analýzy jsou i kvantově mechanické simulace, které umožňují detailní interpretaci naměřených spekter.

**Náplní bakalářské práce** bude experimentální studium AQN metodami ROA a VCD i kvantově mechanické simulace vedoucí k detailní interpretaci spekter.

Vedoucí: RNDr. Václav Profant (profant@karlov.mff.cuni.cz)



### Doporučená literatura:

Stephens, P.J.; Devlin, F.J.; Cheeseman, J.R. *VCD Spectroscopy for Organic Chemists*. CRC Press, 2012.

Nafie, L.A. *Vibrational Optical Activity: Principles and Applications*, John Wiley & Sons, 2011.

Ješko, E. Diplomová práce, MFF UK, 2016.

Kapitán, J. Dizertační práce, MFF UK, 2006.

Profant, V.; Jedorov, A.; Bouř, P.; Baumruk, V. Absolute Configuration Determination of a Taxol Precursor Based on Raman Optical Activity Spectra, *J. Phys. Chem. B*, 2017.

Goljer, I., Molinari, A., He, Y., Nogle, L., Sun, W., Campbell, B. and McConnell, O. (2009), Unexpected rearrangement of enantiomerically pure 3-aminoquinuclidine as a simple way of preparing diastereomeric octahydropyrrolo[2,3-c]pyridine derivatives. *Chirality*, 21: 681–691.