

Formulár ZK - Záverečná karta projektu

Riešiteľ: Ing. Miloš Hricovíni, PhD.	Evidenčné číslo projektu: APVT-51-034504
Názov projektu: Štúdium štruktúry a vlastností biologicky aktívnych glykózaminoglykánov v roztoku a ich komplexov s proteínmi.	
Na ktorých pracoviskách bol projekt riešený:	Chemický ústav SAV
	Farmaceutická fakulta UK
Ktoré zahraničné pracoviská spolupracovali pri riešení (názov, štát):	-
Udelené patenty alebo podané patentové prihlášky, vynálezy alebo úžitkové vzory vychádzajúce z výsledkov projektu:	-
Publikácie (knihy, články, prednášky, správy a pod.) zhrňujúce výsledky projektu (uved'te i publikácie prijaté do tlače alebo pripravované): <i>Uvádzajte maximálne päť najvýznamnejších publikácií.</i>	<u>Hricovíni, M.</u> B3LYP/6-311++G** study of structure and spin-spin coupling constant in methyl 2-O-sulfo- α -L-iduronate. <i>Carbohydr. Res.</i> , 341 (2006) 2575-2580.
	<u>M. Hricovíni, F. Bízik :</u> Relationship between structure and three-bond proton-proton coupling constants in glycosaminoglycans. <i>Carbohydr. Res.</i> , 342 (2007) 779-783.
	<u>Hricovíniová Z.</u> The Effect of Microwave Irradiation on Mo(VI) Catalyzed Transformations of Reducing Saccharides. <i>Carbohydr. Res.</i> , 341 (2006) 2131-2134.
	<u>Hricovíniová, Z.</u> Microwave assisted stereospecific synthesis of D-erythro-L-glucosyl-nonulose. <i>Tetrahedron Asymmetry</i> . Vol. 18 (2007), p.1574-1578.
	<u>Ližičárová, I. - Matulová, M. - Capek, P. - Machová, E.</u> Human pathogen <i>Candida dubliniensis</i> : A cell wall mannan with a high content of β -1,2-linked mannose residues. <i>Carbohydr. Polymers</i> , Vol. 70 (2007), p. 89-100.
V čom vidíte uplatnenie výsledkov tohto projektu:	Výsledky prinášajú nové poznatky o syntéze, štruktúre, vlastnostiach biologicky významných sacharidov a ich komplexov s proteínmi.

Podpisom záverečnej karty riešiteľ vyjadruje svoj súhlas ku zverejneniu údajov v nej uvedených.

Podpis riešiteľa:

Dátum:

Charakteristika výsledkov

Evidenčné číslo: APVT-51-034504

Súhrn výsledkov riešenia projektu a naplnenia cieľov projektu (max. 20 riadkov) - slovensky:

Uskutočnili sa detailné štúdiá disacharidu heparínového typu (GlcN,6-SO₃-IdoA2-SO₃-OMe), tetrasacharidov (GlcN,6-SO₃-IdoA2-SO₃-GlcN,6-SO₃-IdoA2-SO₃-OMe), pentasacharidu (GlcN,6-SO₃-GlcA-GlcN,3,6-SO₃-IdoA2-SO₃-GlcN,6-SO₃-OMe) ako aj hexasacharidov typu GlcN,6-SO₃-IdoA2-SO₃-GlcN,6-SO₃-IdoA2-SO₃-GlcN,6-SO₃-IdoA2-SO₃-OMe metódami NMR spektroskopie ako aj teoretickou DFT analýzou. Študovala sa štruktúra týchto molekúl, ich dynamické vlastnosti ako aj vplyv prostredia. Vypočítali sa trojväzbové H-H a C-H interakčné konštanty, jednoväzbové konštanty C-H a analyzovala sa ich závislosť od štruktúry molekúl. Navrhla sa závislosť trojväzbových interakčných konštant H-H od torzných uhlov v jednoduchom analytickom tvare. Uskutočnilo sa molekulové modelovanie a NMR štúdium interakcie tetrasacharidu s proteínom FGF-1 a FGF-2 a navrhli sa väzbové modely.

Pripravili sa vzácne ketózy z ľahko dostupných 2-C-hydroxymetyl-vetvených aldóz izomerizačnou reakciou katalyzovanou Mo(VI) iónmi v mikrovlnnom poli. Práce uskutočnené v rámci projektu vyzdvihujú výhody Mo(VI) katalýzy a priaznivý účinok mikrovlnného žiarenia v syntéze sacharidov. Transformáciou bolo možné získať 2-ketózy vo veľmi dobrých výťažkoch (46-86%). Boli pripravené 6-O-deriváty (vanilyl- a izovanilyl-) D-glukózy a D-manózy, ktoré boli testované s DPPH metódou. Testy ukázali, že skúmané deriváty vykazujú aktivitu ako účinné lapače radikálov. NMR spektroskopiou sa analyzovala ich štruktúra, ako aj štruktúra vybraných polysacharidov.

Súhrn výsledkov riešenia projektu a naplnenia cieľov projektu (max. 20 riadkov) - anglicky:

Detailed experimental NMR and theoretical DFT studies have been performed on heparin-like disaccharide GlcN,6-SO₃-IdoA2-SO₃-OMe, tetrasaccharide (GlcN,6-SO₃-IdoA2-SO₃-GlcN,6-SO₃-IdoA2-SO₃-OMe), pentasaccharide (GlcN,6-SO₃-GlcA-GlcN,3,6-SO₃-IdoA2-SO₃-GlcN,6-SO₃-OMe) as well as hexasaccharides GlcN,6-SO₃-IdoA2-SO₃-GlcN,6-SO₃-IdoA2-SO₃-GlcN,6-SO₃-IdoA2-SO₃-OMe. Molecular structure, dynamics, solvent effects, three-bond proton-proton and proton-carbon, as well as one-bond proton-carbon coupling constants were analyzed by both NMR and DFT. Molecular modeling and DFT analysis enabled characterization of the dependence of three-bond proton-proton coupling constants upon torsion angles in a simple analytical expression. In addition, interactions of heparin-tetrasaccharide with FGF-1 and FGF-2 proteins have been studied by NMR and molecular modeling.

Rare ketoses have been prepared from 2-C-hydroxymethyl-branched aldoses by isomerization reaction (catalyzed by Mo(VI) ions) under conditions of microwave (MW) irradiation. The approach underlines the effect of Mo(VI)-catalysis and MW irradiation in synthesis of saccharides. Several 2-ketoses could be obtained in high yields (46-86%). In addition, 6-O-derivatives (vanilyl- and isovanilyl-) of D-glucose and D-mannose were prepared and tested by DPPH method. These tests showed that synthesized derivatives have scavenging activities. Further studies were also focussed on NMR structural analysis of monosaccharide derivatives and isolated polysaccharides.

Podpis riešiteľa: