



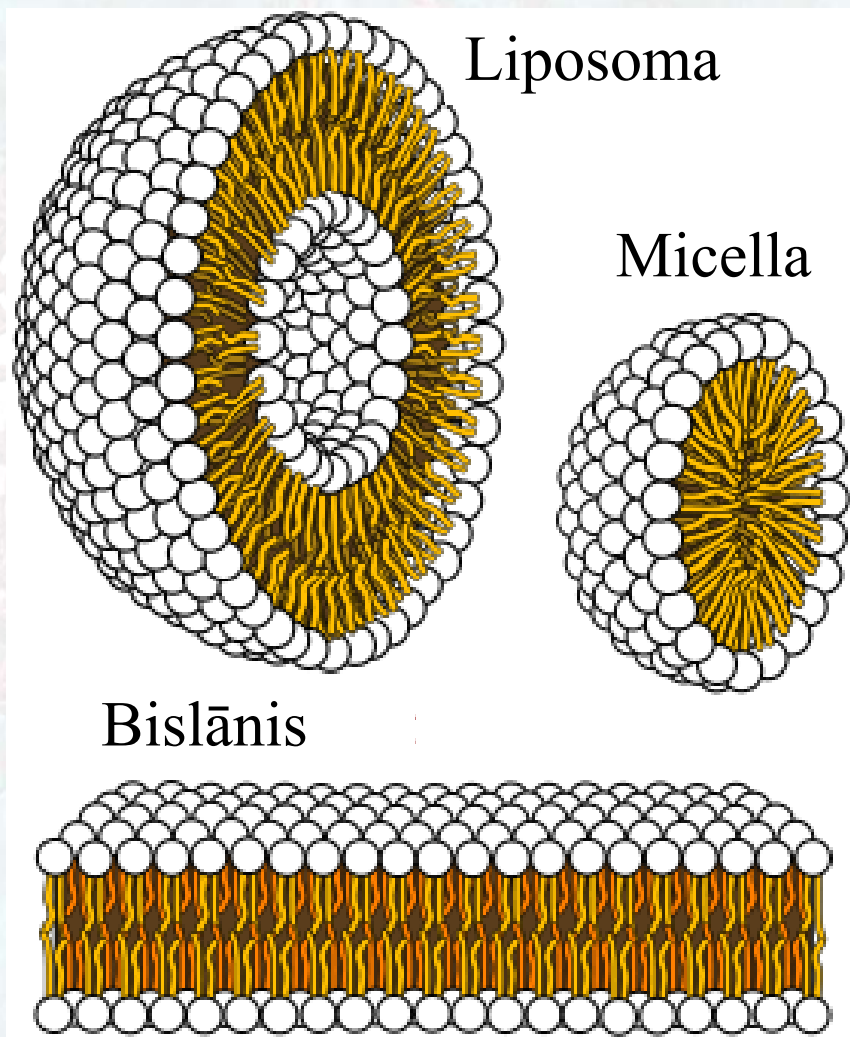
# **MĀKSLĪGO VEZIKULU PĒTĪŠANA AR KMR METODĒM**

**15.11.2011**

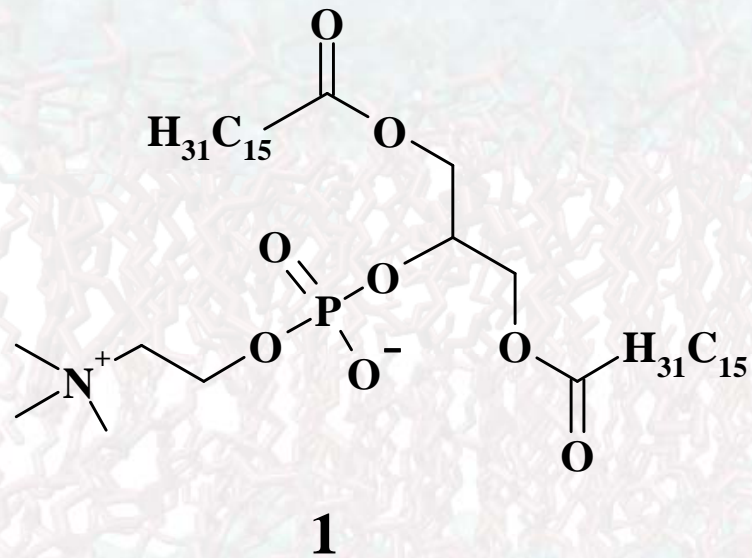
# Darba aktualitāte

- Vezikulas (liposomas) uzskata par perspektīviem DNS transfekcijas aģentiem, kā arī ārstniecības vielu transportieriem.
- Liposomu vidējā izmēra samazināšanai un stabilitātes palielināšanai ir būtiska nozīme, tos pielietojot ārstniecības vielu pārnesei dzīvajos organismos.
- Pēdējo gadu laikā Latvijas Organiskās sintēzes institūta Membrānaktīvo savienojumu un  $\beta$ -diketonu laboratorijā sintezēti jauni potenciāli gēnu transfekcijas aģenti - 1,4-DHP atvasinājumi ar pozitīvu lādiņu molekulā, kuri līdz šim nebija sistemātiski pētīti ar KMR metodēm.

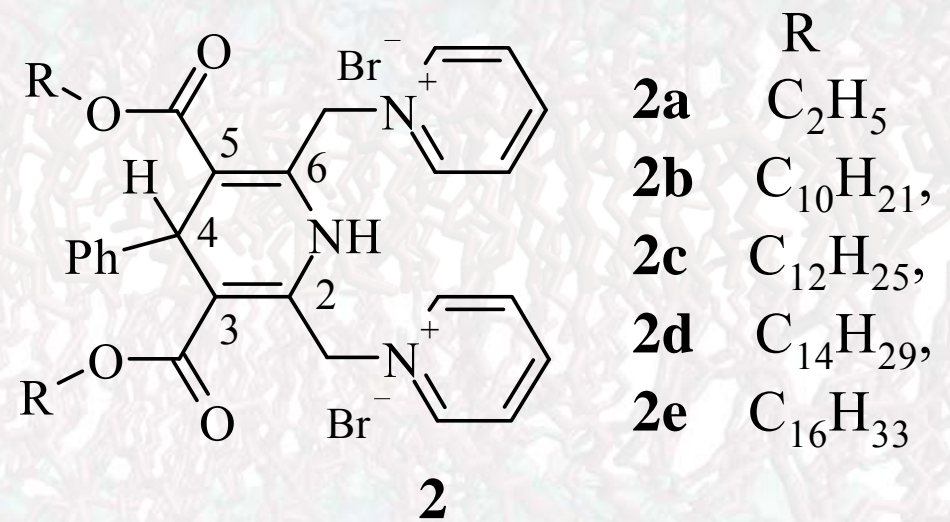
Fosfolipīdi un citi amfifīlie lipīdi ūdens šķīdumā veido šādas nanodaļiņas:



# Pētītie objekti



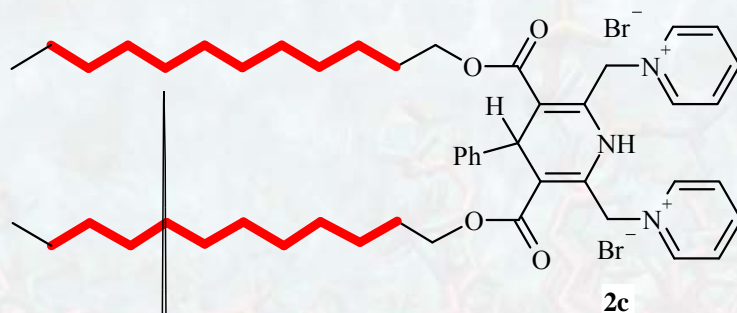
Dipalmitoilfosfatidilholīns  
( $\beta$ -DPPC)



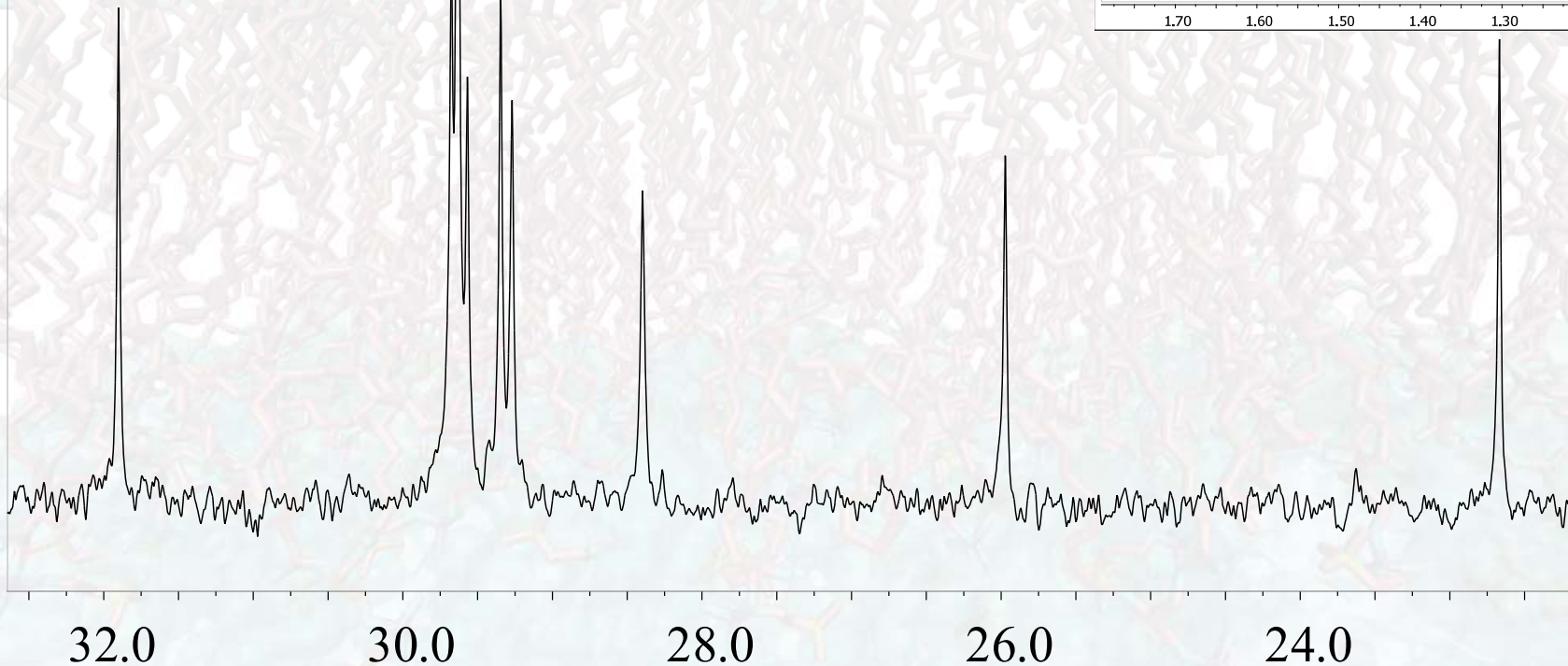
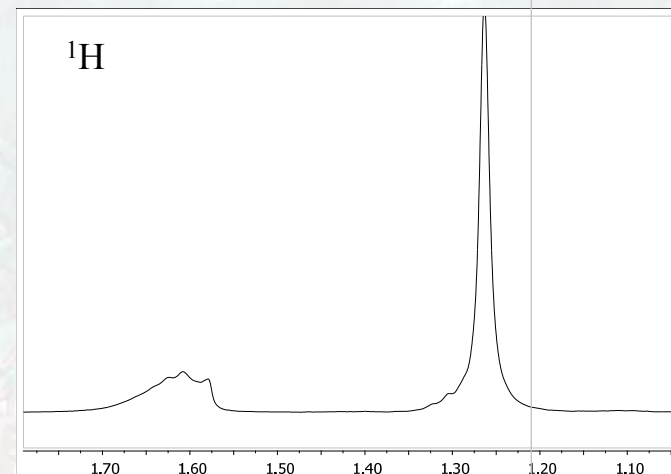
1,4-DHP atvasinājumi

# Alkilķēžu $^1\text{H}$ un $^{13}\text{C}$ KMR spektru rajons

$^{13}\text{C}$

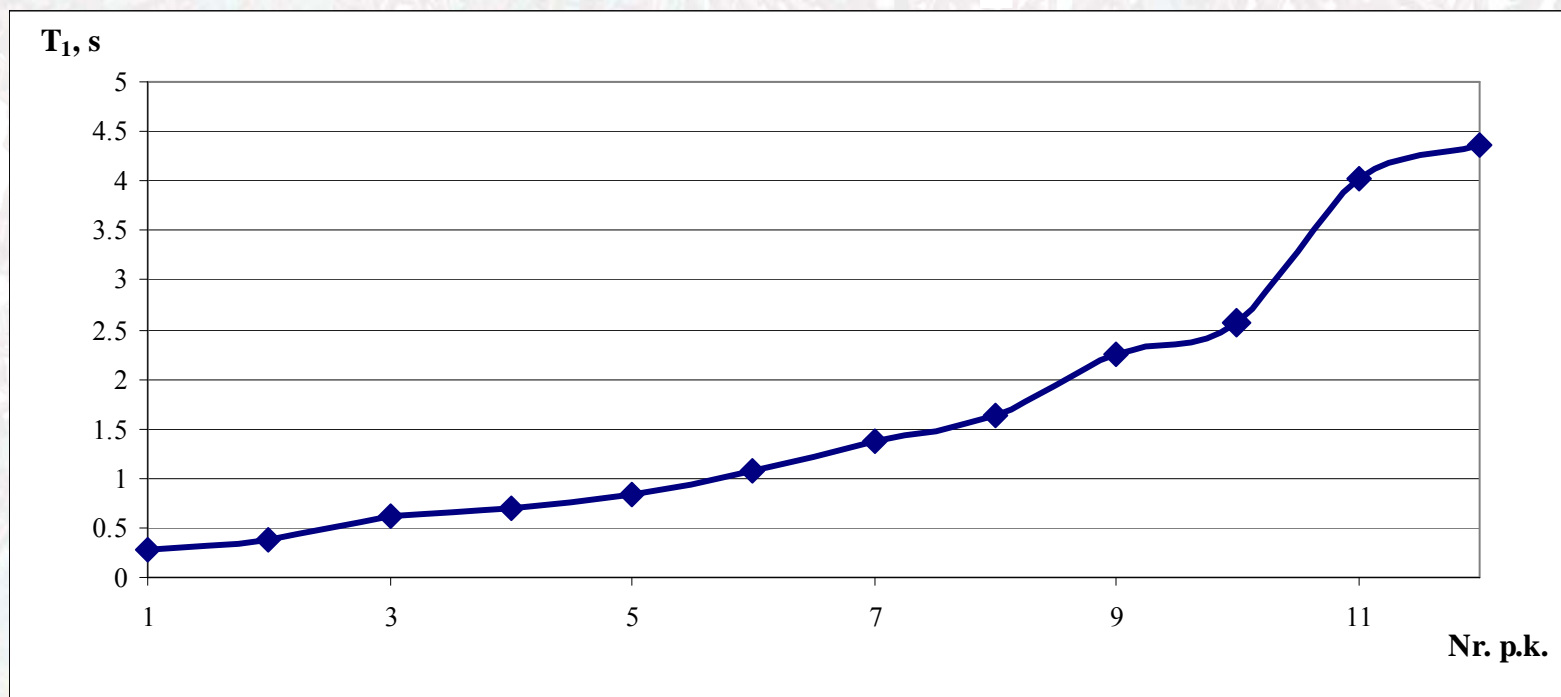
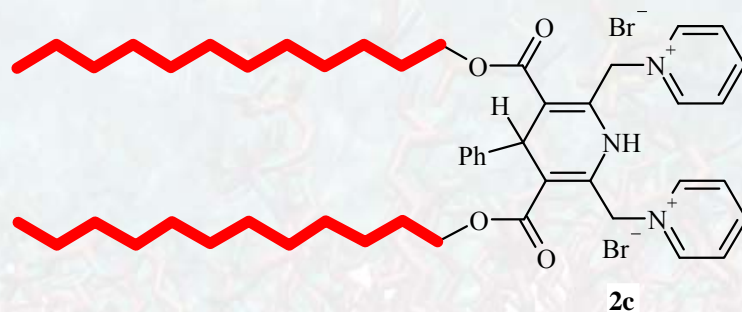


$^1\text{H}$

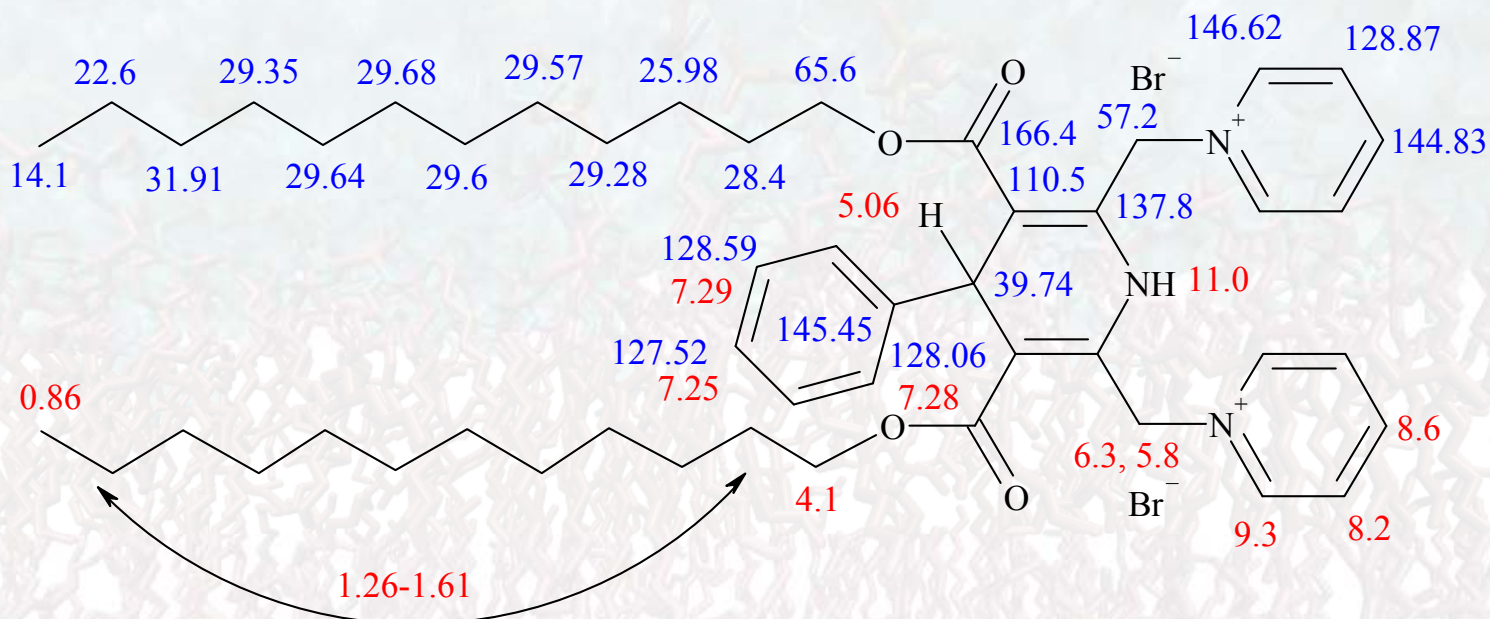


Hidrofobo fragmentu oglekļa kodolu signāliem, kas rezonē 29-30 m.d. diapazonā, ķīmisko nobīžu atšķirības bija niecīgas.

# $^{13}\text{C}$ KMR spina-režģa relaksācijas laiks $T_1$



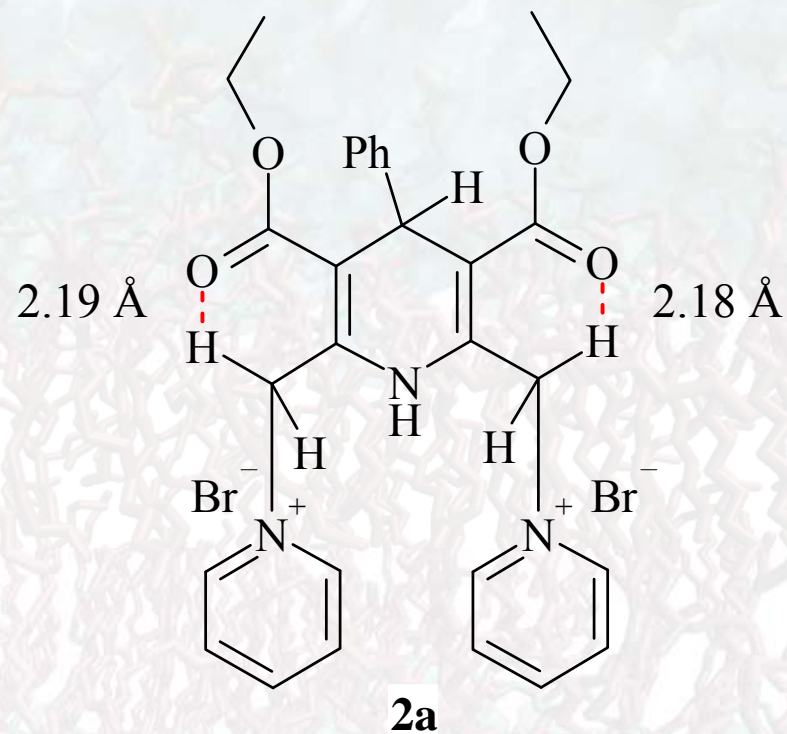
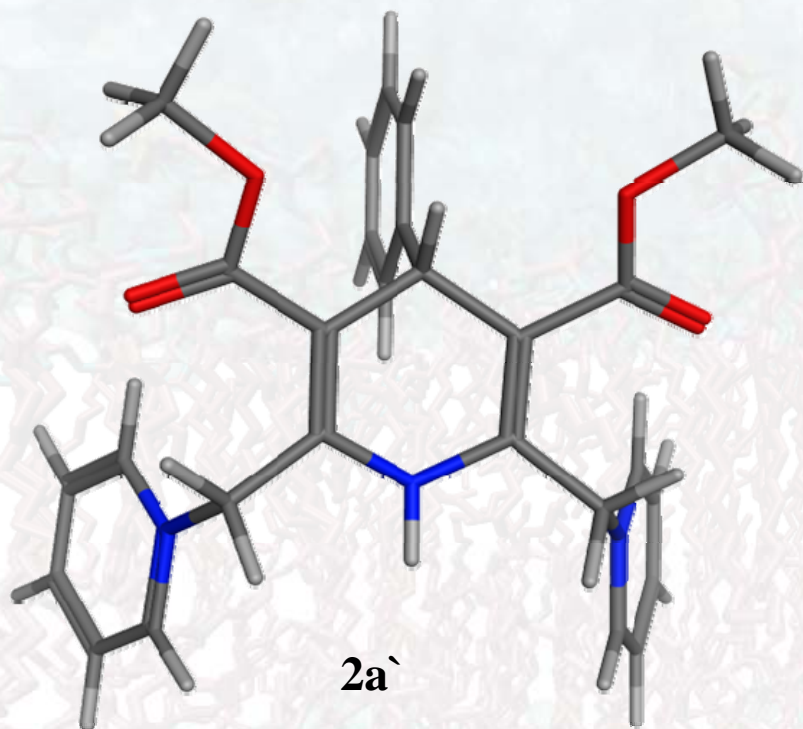
Savienojuma **2c**  $^{13}\text{C}$  KMR  $T_1$  relaksācijas laika izmaiņas atkarībā no oglekļa atoma vietas alkilķēdē



Savienojuma **2c**  $^{13}\text{C}$  un  $^1\text{H}$  KMR ķīmisko nobīžu vērtības.

Izmantojot mūsdienīgas vien- un divdimensionālas KMR metodes veikta pilna  $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$  KMR spektru identifikācija.

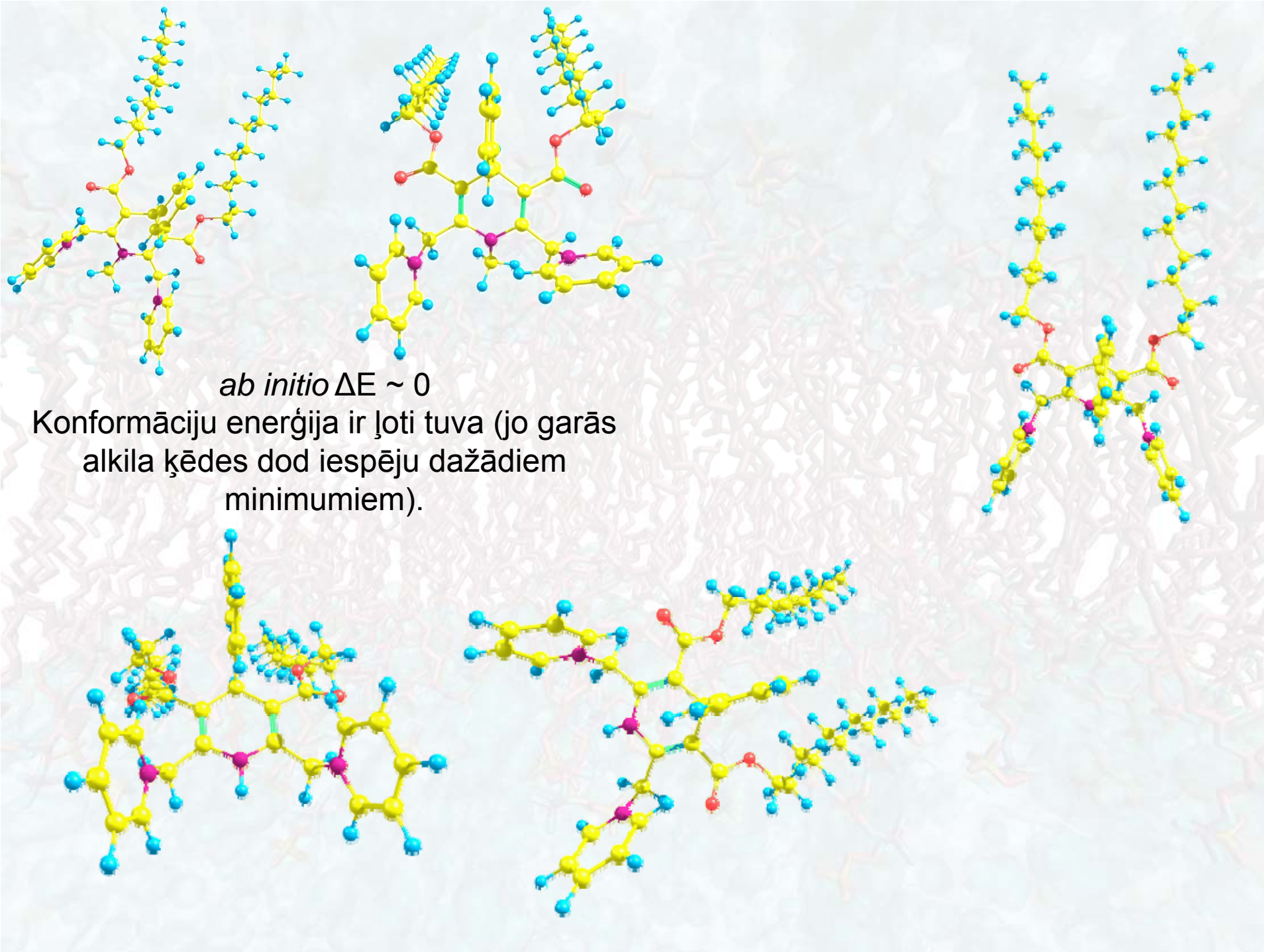
# Kvantu-ķīmiskie pētījumi



Optimālā konformācijā iekšmolekulārās ūdeņraža saites (C-H...O=C) stabilizē konformāciju pa saitēm C<sub>3,5</sub>-CO un C<sub>2,6</sub>-CH<sub>2</sub>.

DFT B3LYP 6-311G\*\*++





**1, 2c un 2a**  $^1\text{H}$  un  $^{31}\text{P}$  KMR spektros signālu paplašināšanās ūdenī (5 son.) salīdzinot ar hloroforma šķīdumiem.

