

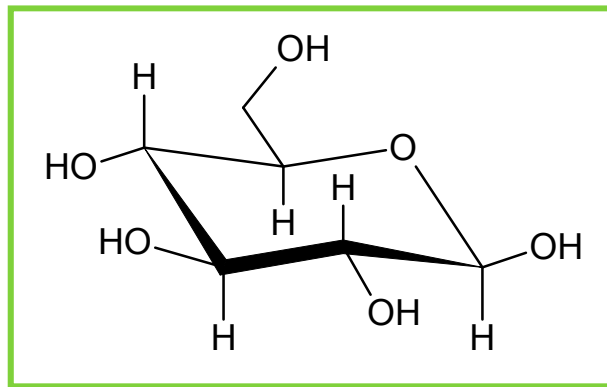
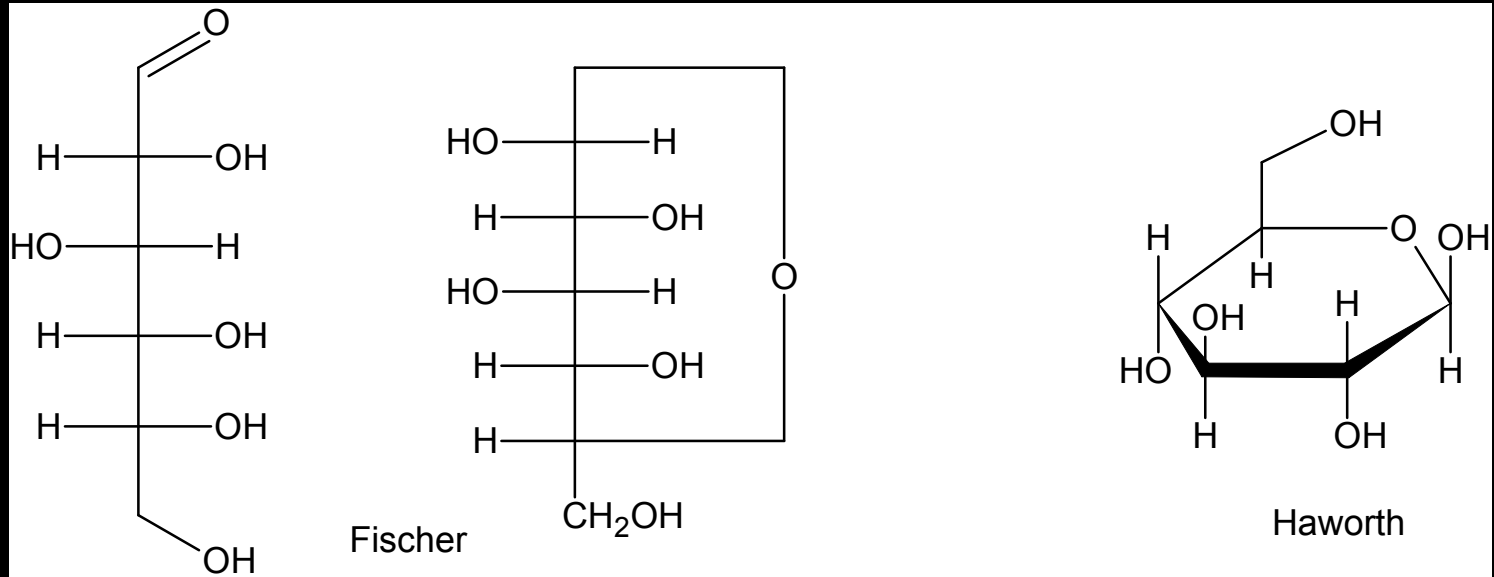
**ΕΘΝΙΚΟ ΚΑΙ ΚΑΠΟΔΙΣΤΡΙΑΚΟ  
ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΑΘΗΝΩΝ  
ΦΑΡΜΑΚΕΥΤΙΚΟ ΤΜΗΜΑ  
ΤΟΜΕΑΣ ΦΑΡΜΑΚΟΓΝΩΣΙΑΣ**

- ΤΡΟΠΟΙ ΓΡΑΦΗΣ ΣΑΚΧΑΡΩΝ
- ΔΙΑΜΟΡΦΩΣΗ ΣΑΚΧΑΡΩΝ
- ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑΤΑ ΦΑΣΜΑΤΩΝ H-NMR

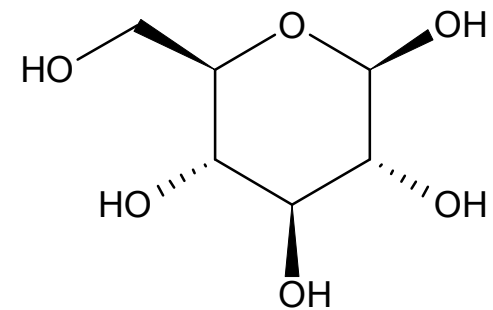


**ΠΡΟΚΟΠΙΟΣ ΜΑΓΙΑΤΗΣ**

# ΤΡΟΠΟΙ ΓΡΑΦΗΣ ΣΑΚΧΑΡΩΝ



Ανάκλινδρο



stereo- προβολή

β-D-γλυκόζη

# Διάκριση σε α/β ανωμερή

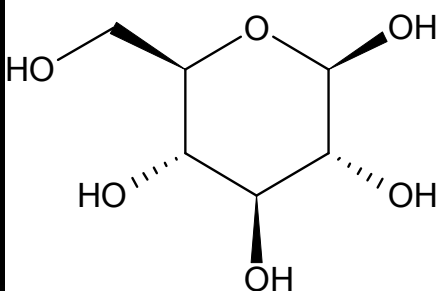
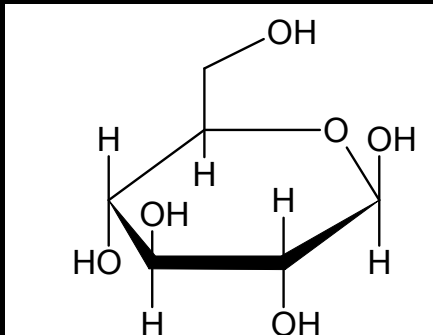
$\beta =$

OH

Πάνω

από το

επίπεδο



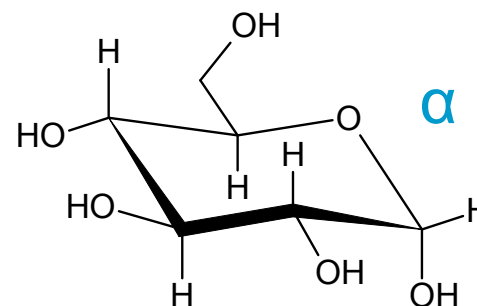
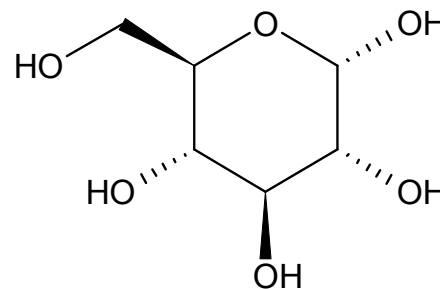
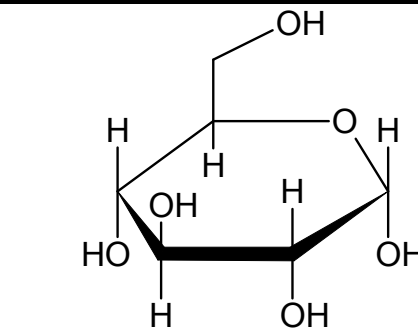
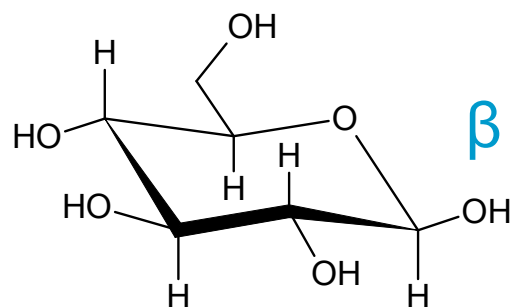
$\alpha =$

OH

Κάτω

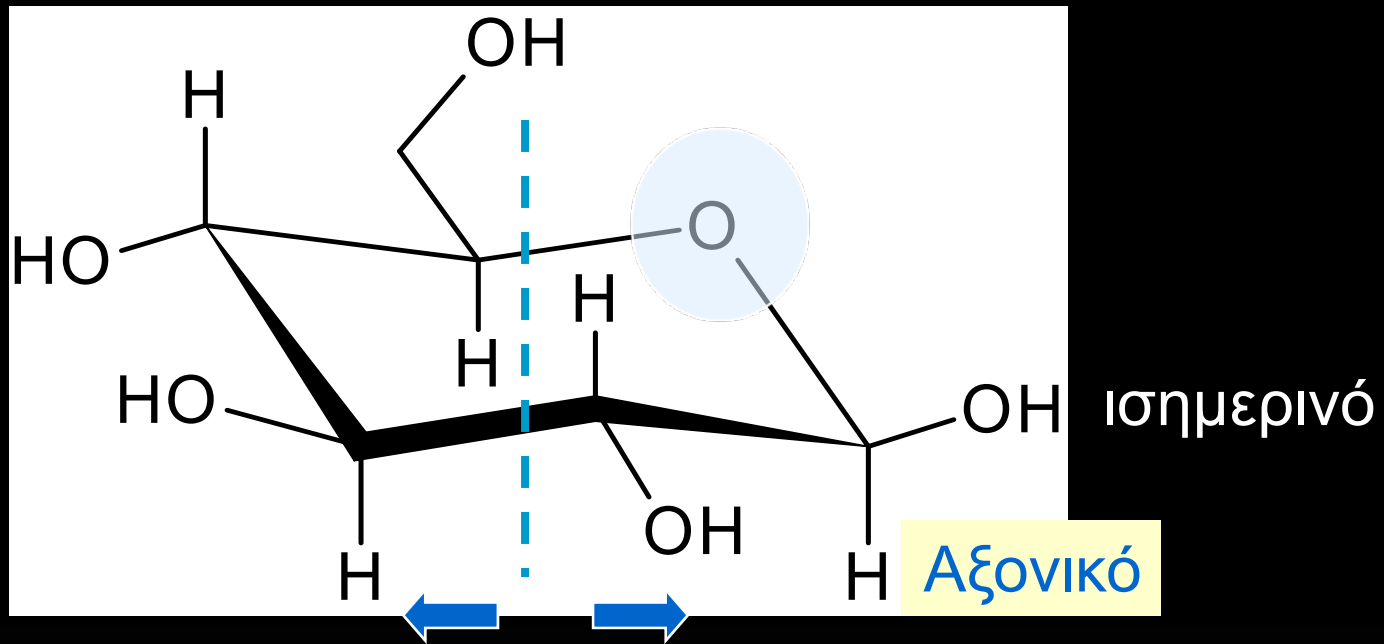
από το

επίπεδο



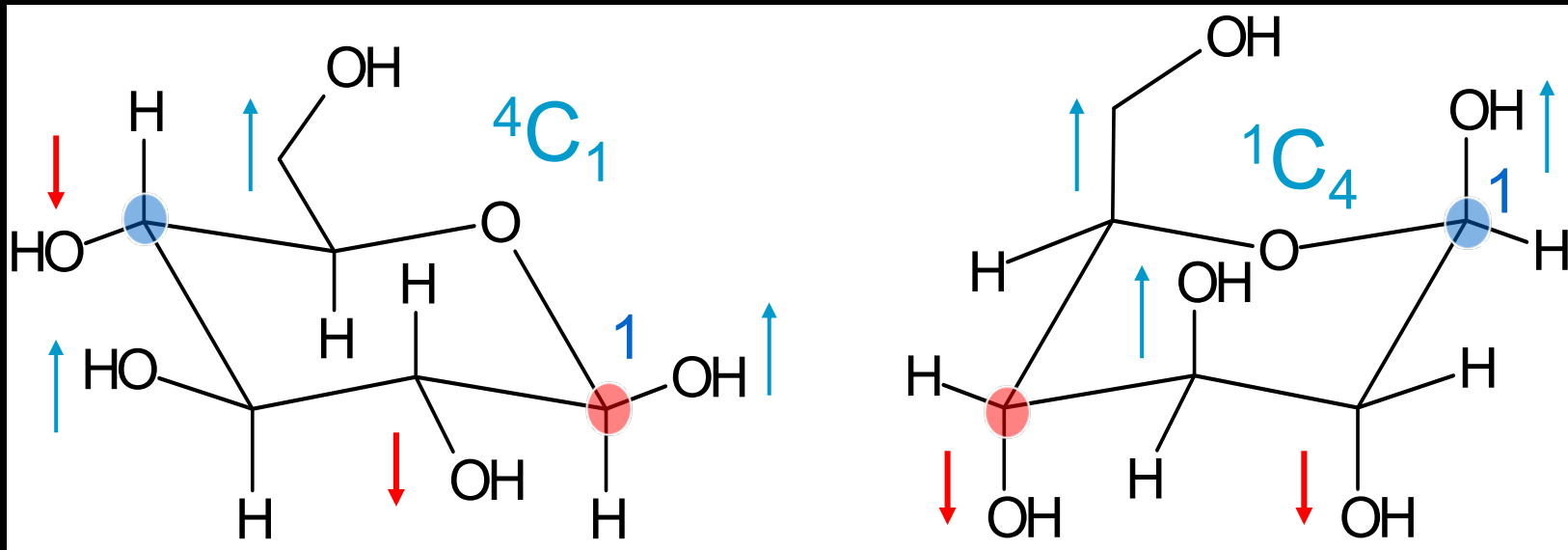
Ισχύει για τα D-σάκχαρα

# Τρόπος γραφής ανακλίνδρου Αξονική-ισημερινή διάταξη



- Το ετεροκυκλικό οξυγόνο τοποθετείται πίσω δεξιά και η ανωμερική θέση δίπλα του δεξιά.
- Οι αξονικοί υποκαταστάτες τοποθετούνται εναλλάξ κάθετα πάνω και κάτω από το επίπεδο με κατεύθυνση προς το σημείο που δείχνει η γωνία του ανακλίνδρου στην οποία συνδέονται.
- Οι ισημερινοί υποκαταστάτες συνδέονται σε κάθε σημείο με αντίθετη κατεύθυνση από τους αξονικούς και κοιτάζοντας δεξιά ή αριστερά ανάλογα με τα αν βρίσκονται δεξιά ή αριστερά της κεντρικής γραμμής

# Διαμορφωμερή ${}^1C_4 - {}^4C_1$



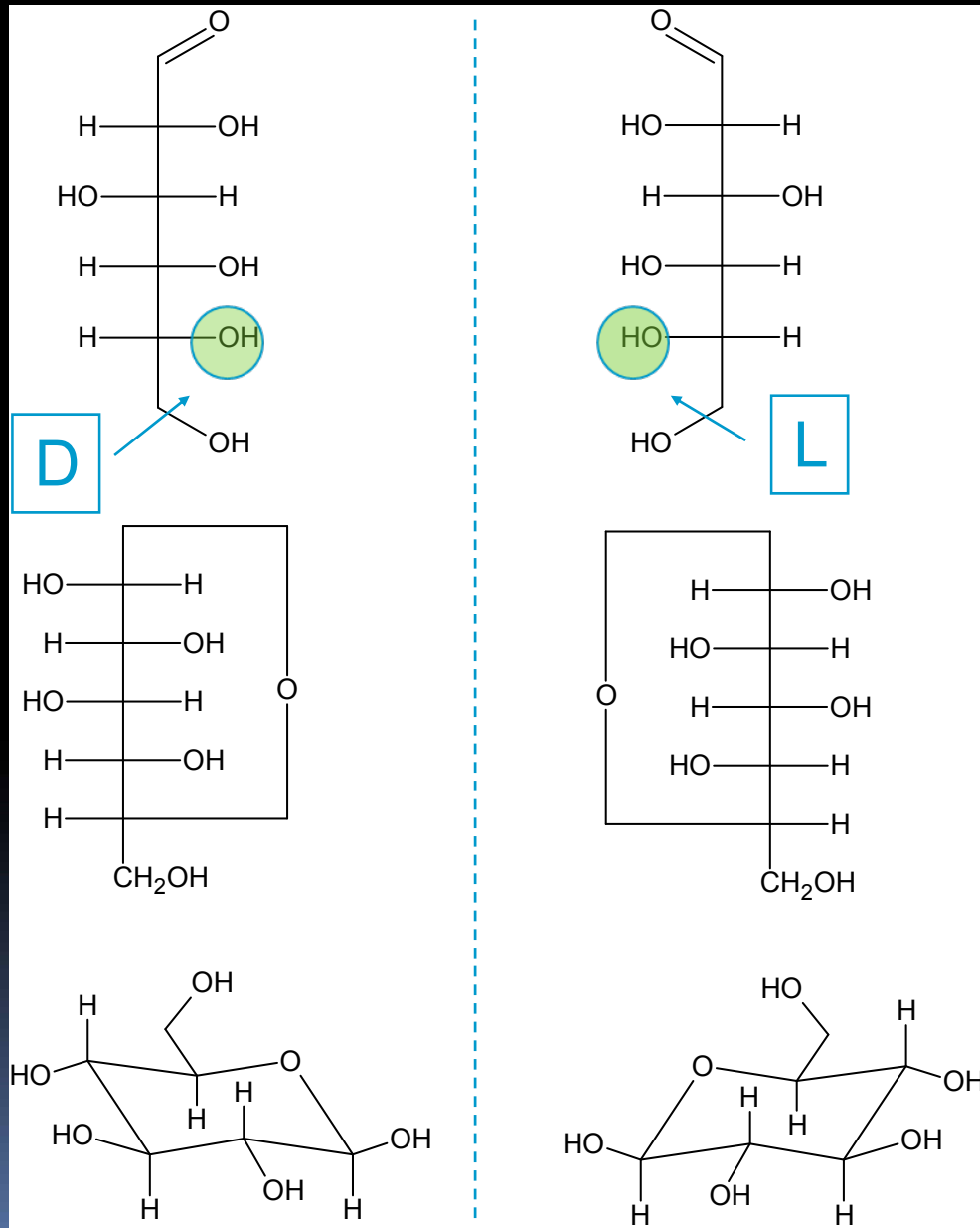
- Τόσο η σχετική όσο και η απόλυτη στεreoχημεία στις παραπάνω δομές είναι ταυτόσημη. Έχουν ισομέρεια διαμόρφωσης.
- Για κάθε σάκχαρο επικρατεί διαφορετικό διαμορφωμερές με βασικό κριτήριο ο ογκωδέστερος υποκαταστάτης να είναι σε ισημερινή διάταξη
- Για τη  **$\beta$ -D-γλυκόζη** επικρατεί η διαμόρφωση  ${}^4C_1$ . Είναι η πιο διαδεδομένη δομική μονάδα στη φύση γιατί όλοι οι υποκαταστάτες έχουν ισημερινή διάταξη

# ΔΙΑΚΡΙΣΗ ΣΕ D/L

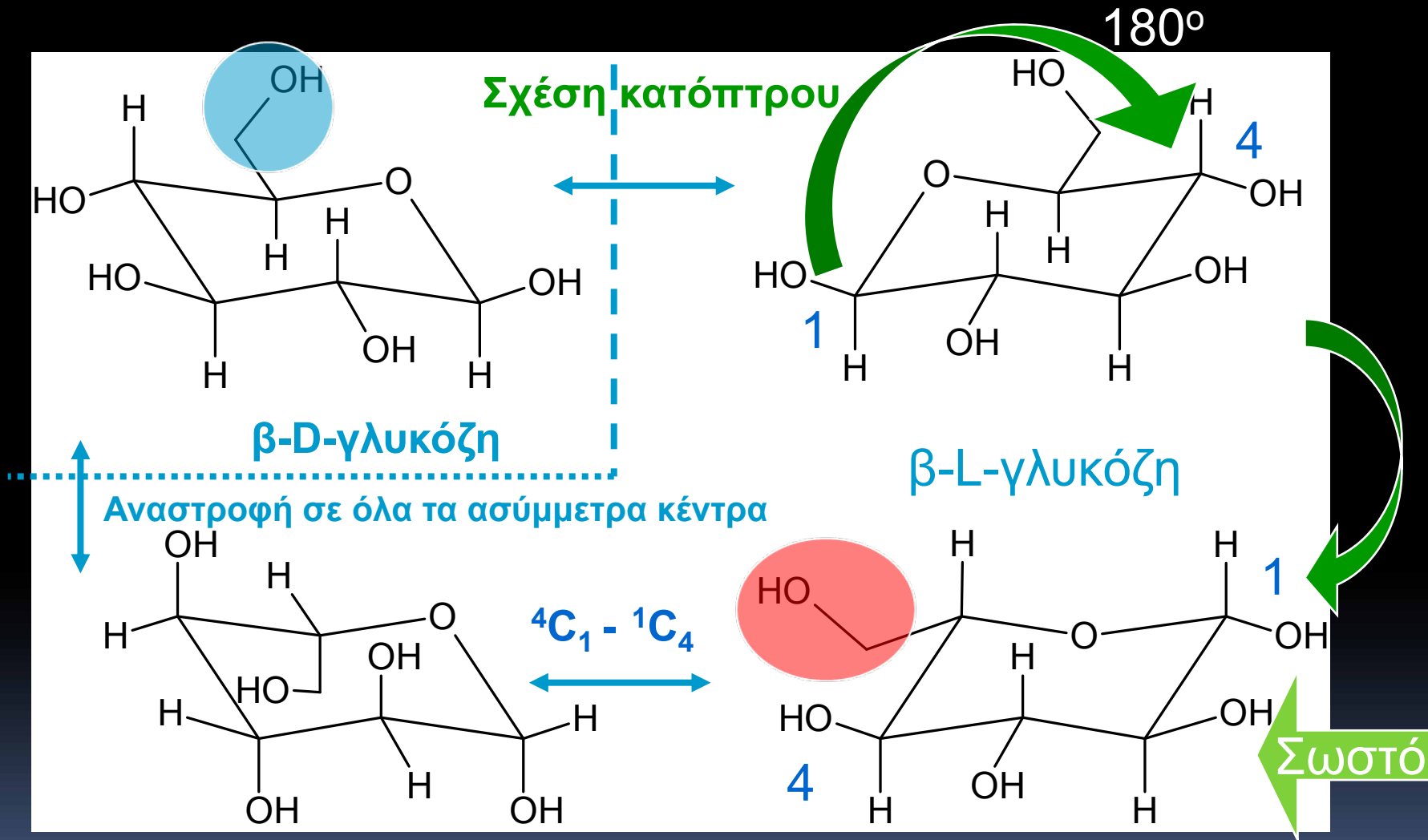
Το τελευταίο OH  
Προς τα δεξιά  
⇒D

Το τελευταίο OH  
Προς τα αριστερά  
⇒L

⇒Αυθαίρετος  
ορισμός 1906 με  
βάση τη (+)  
γλυκεριναλδεύδη



# D/L σε ανάκλινδρο

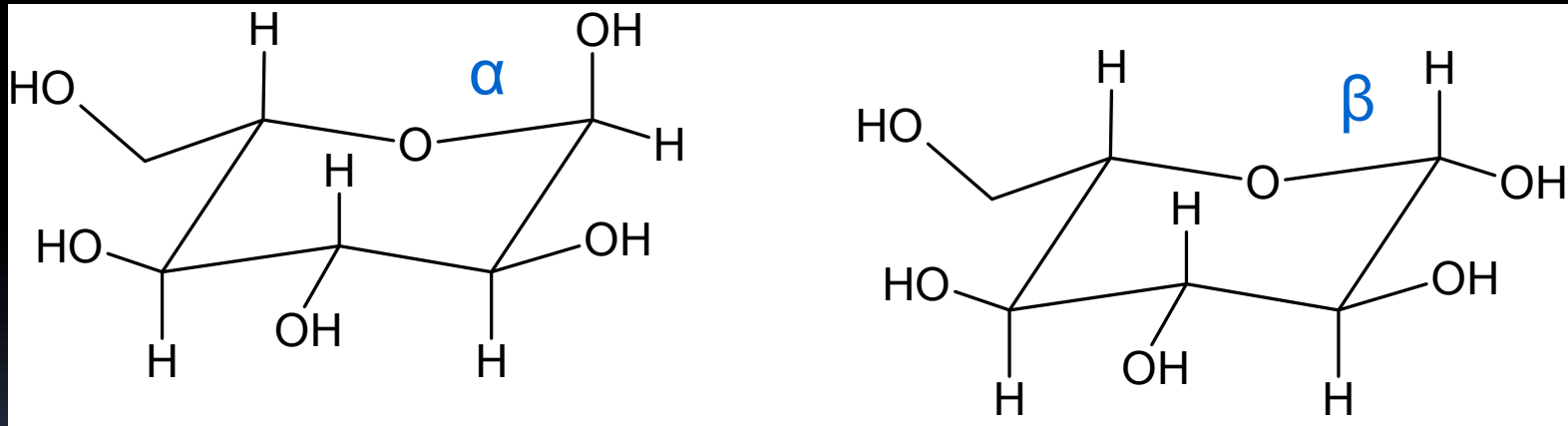


- D: ο υποκαταστάτης της 6 θέσης πάνω από το επίπεδο
- L: ο υποκαταστάτης της 6 θέσης κάτω από το επίπεδο

# α/β στα L σάκχαρα

- Στα L σάκχαρα έχουμε αντιστροφή της έννοιας α και β στην ανωμερική θέση με την προϋπόθεση ότι το ετεροκυκλικό οξυγόνο γράφεται πίσω και δεξιά με την ανωμερική θέση δεξιά δίπλα στο οξυγόνο

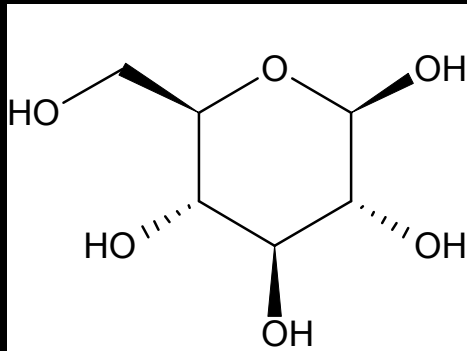
## L-γλυκόζη



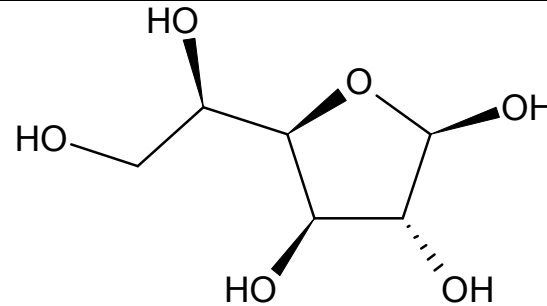
Στα L σάκχαρα: β = κάτω από το επίπεδο  
α = πάνω από το επίπεδο



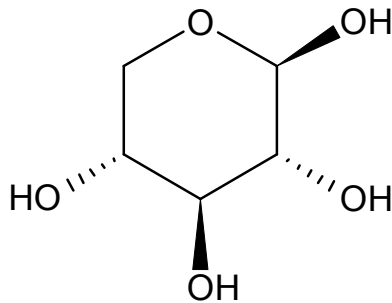
# Πυρανόζες-φουρανόζες Πεντόζες-εξόζες



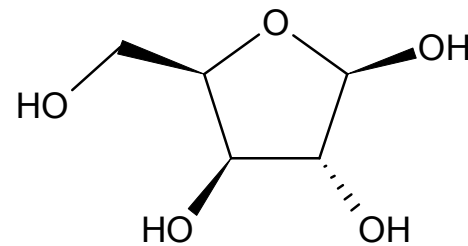
**$\beta$ -D-Glucopyranose**



**$\beta$ -D-Glucofuranose**

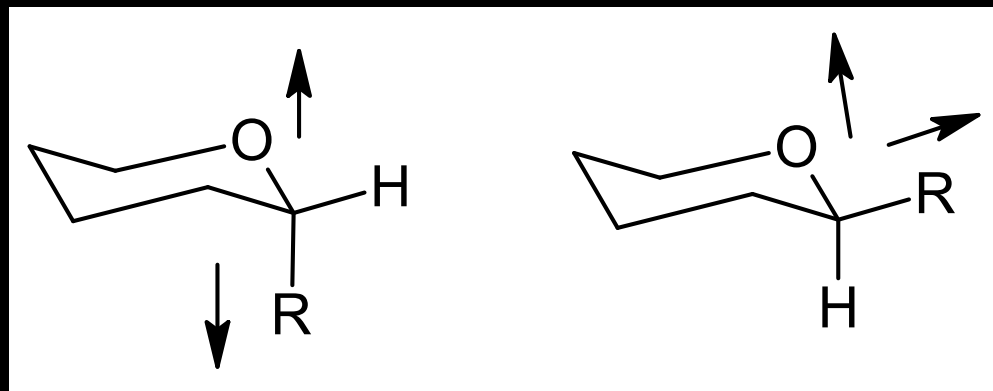


**$\beta$ -D-Xylopyranose**



**$\beta$ -D-Xylofuranose**

# Ανωμερικό φαινόμενο

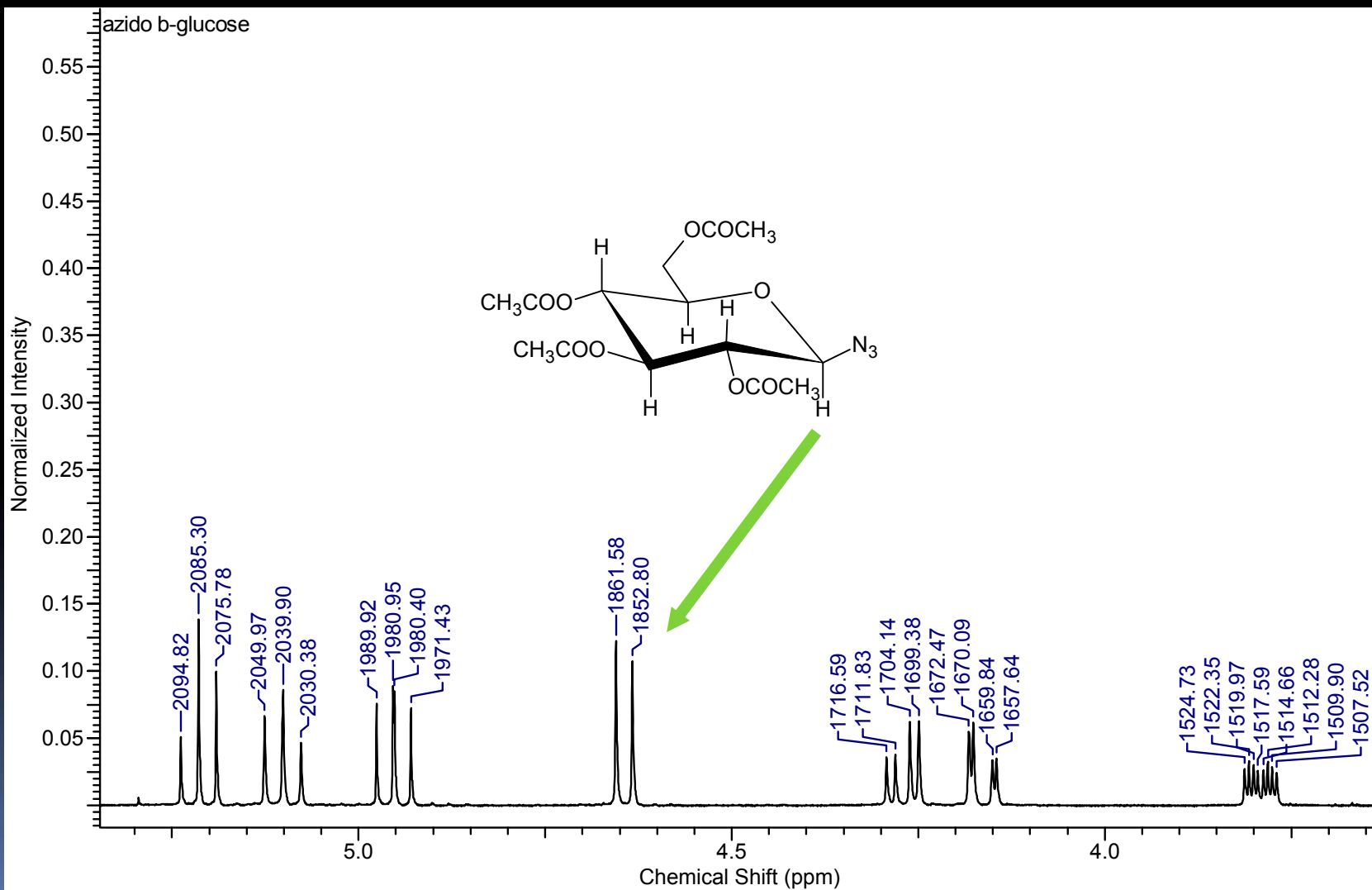


- Λόγω αλληλεπιδράσεων διπόλου-διπόλου μεταξύ ετεροκυκλικού οξυγόνου και ηλεκτραρνητικής ομάδας R, ο υποκαταστάτης στο ανωμερικό κέντρο προτιμά την αξονική διεύθυνση
- Ισχύς ανωμερικού φαινομένου:
  - Αλογόνο > OCOPh > OCOCH<sub>3</sub> > OMe > OH > NH<sub>2</sub>
  - Μειώνεται με αύξηση πολικότητας διαλύτη

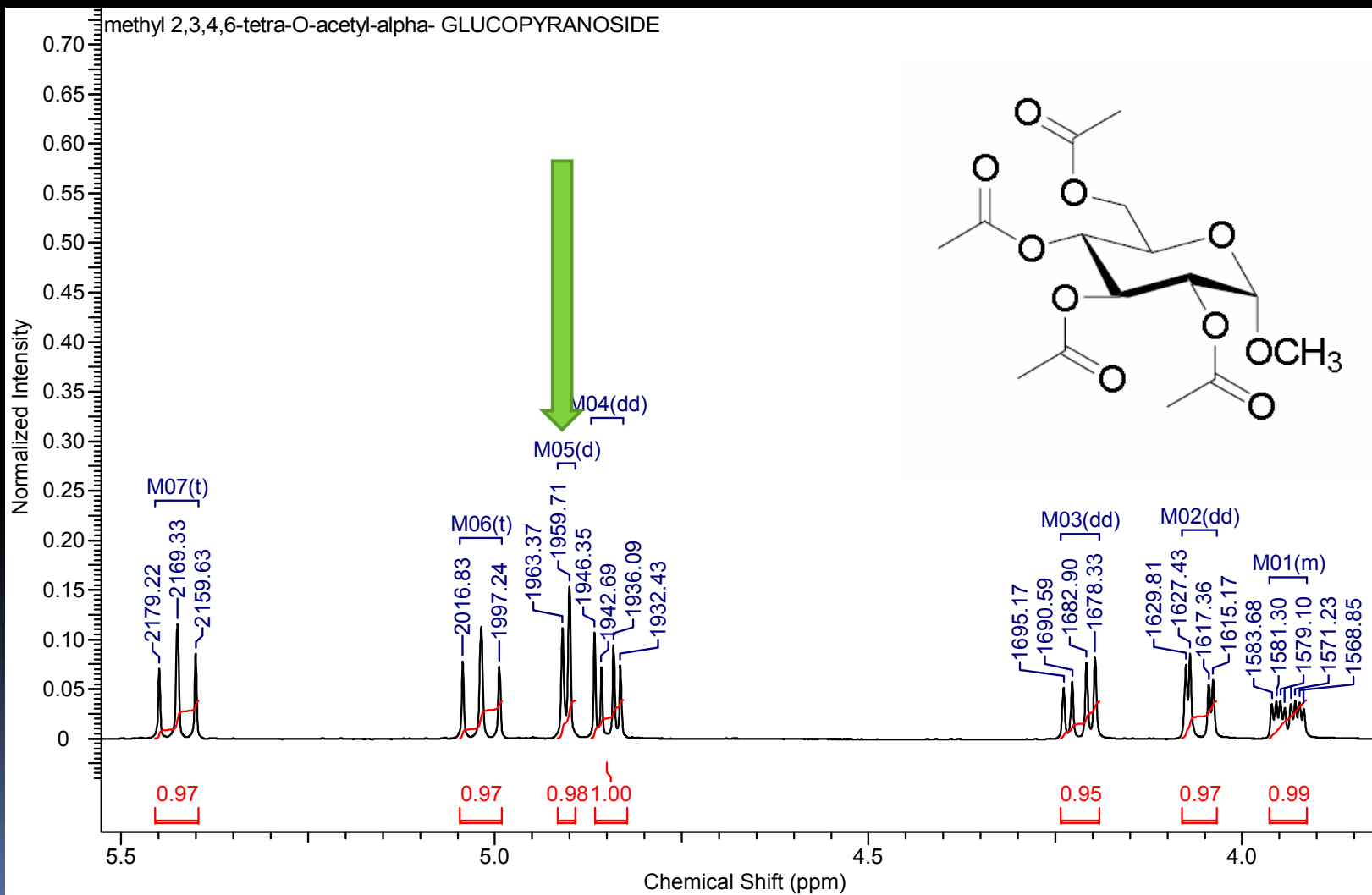
# Σταθερες σύζευξης J

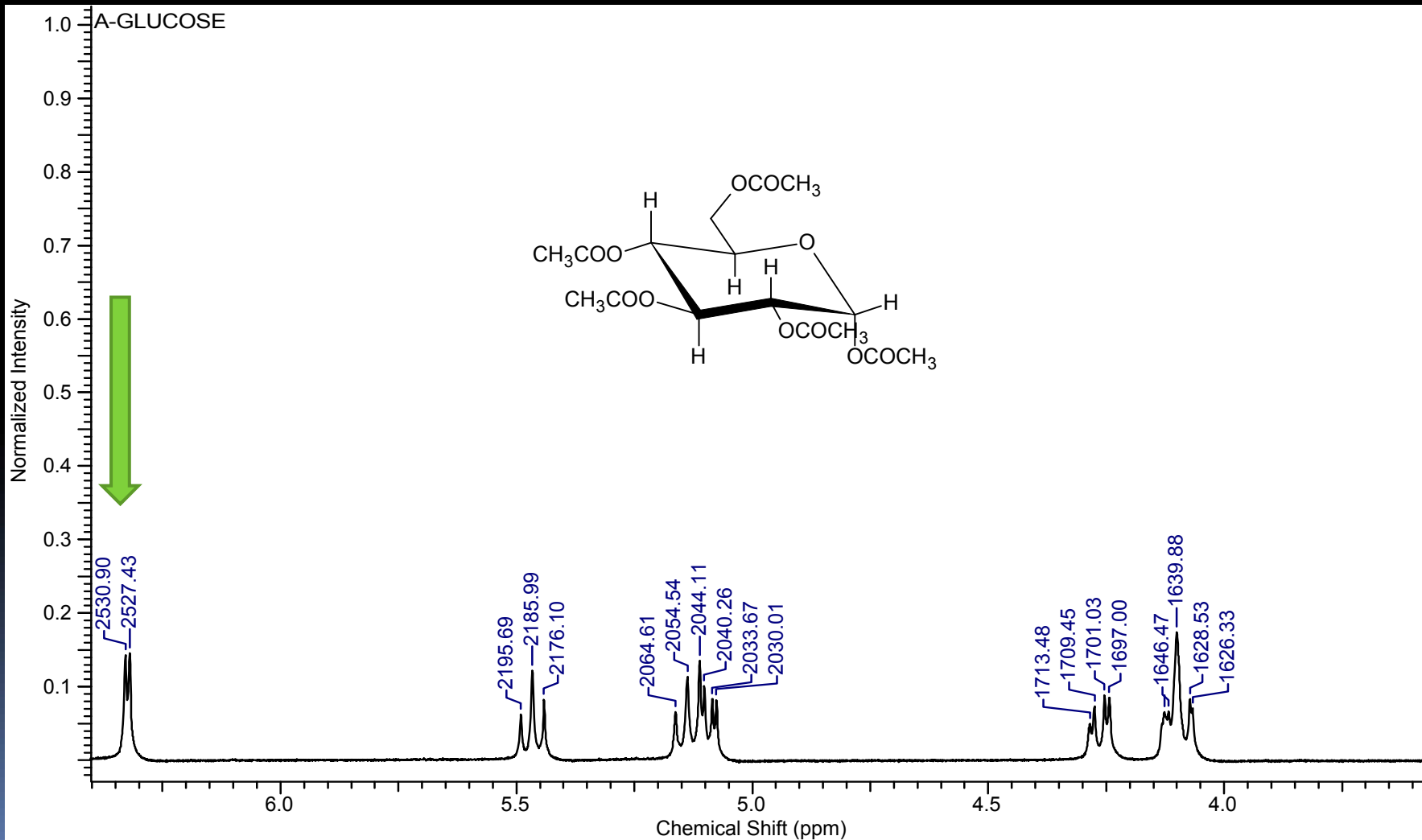
- ax-ax : 8-10 Hz
- Ax-eq: 2-5 Hz
- Eq-eq: 0-2 Hz
- Geminal : 12-16 Hz

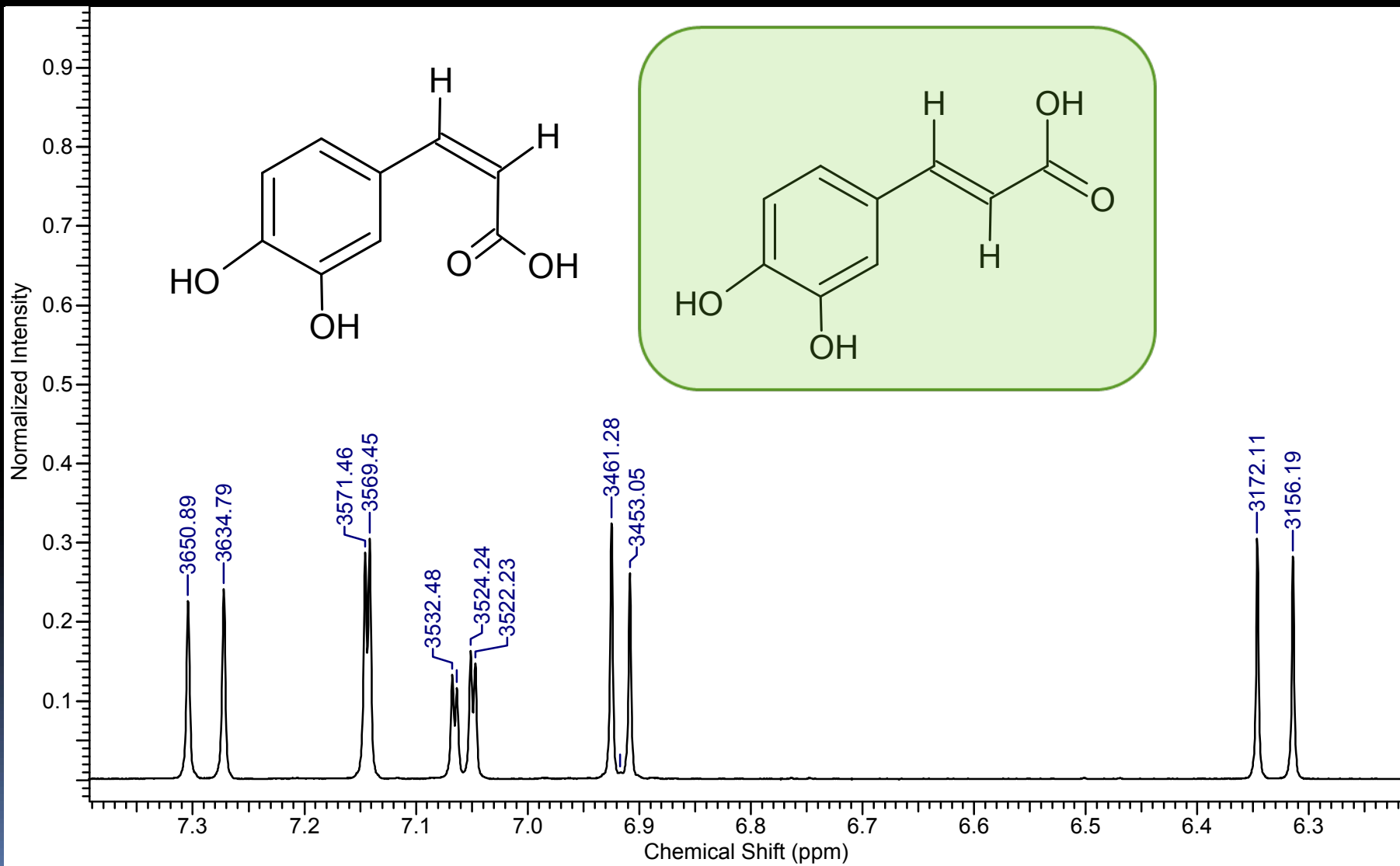
azido b-glucose



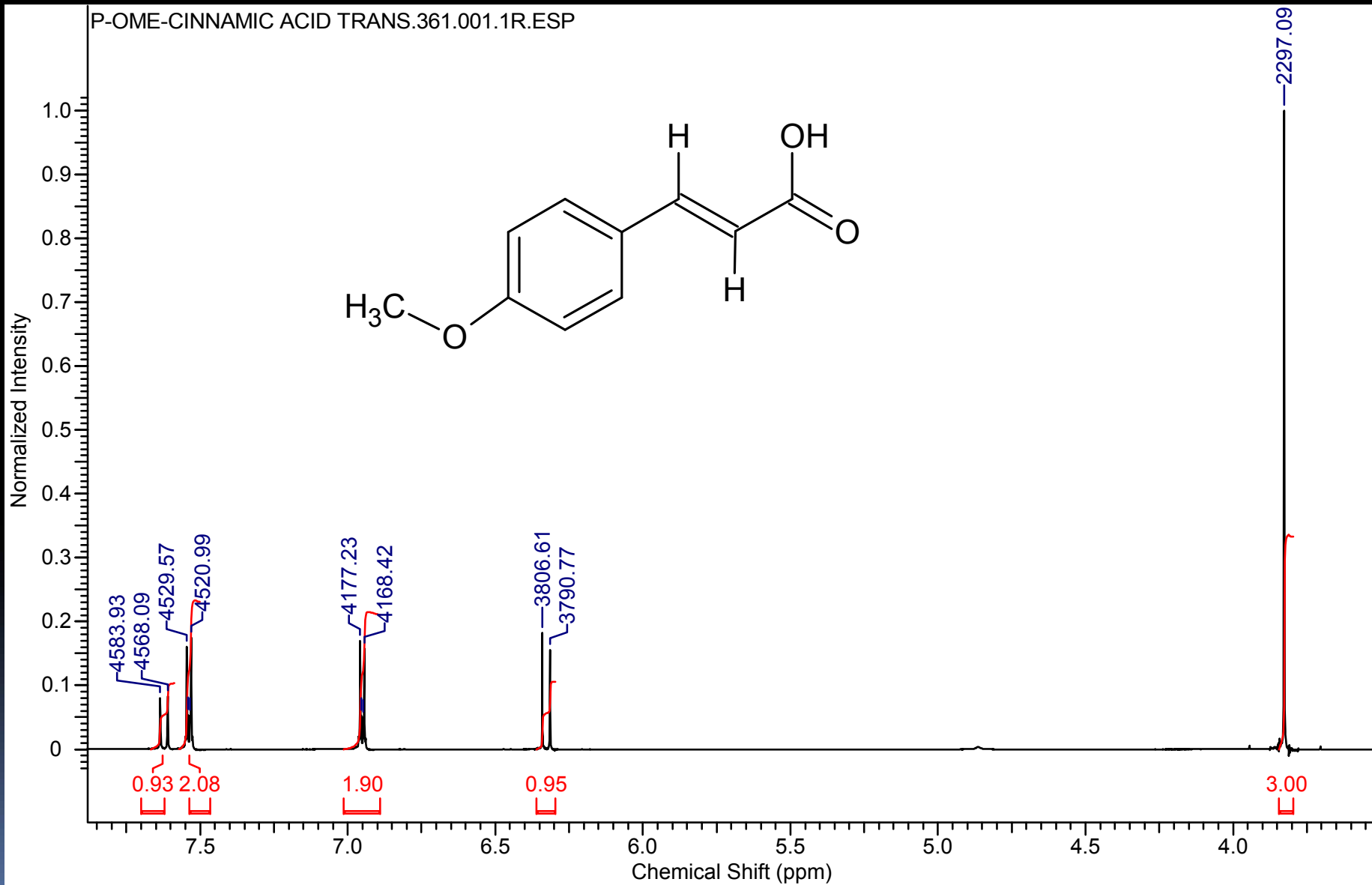
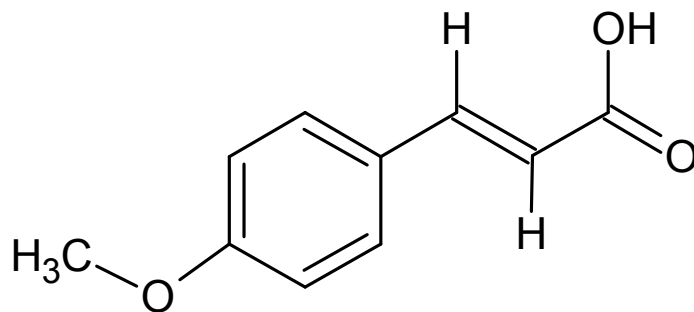
methyl 2,3,4,6-tetra-O-acetyl-alpha- GLUCOPYRANOSIDE





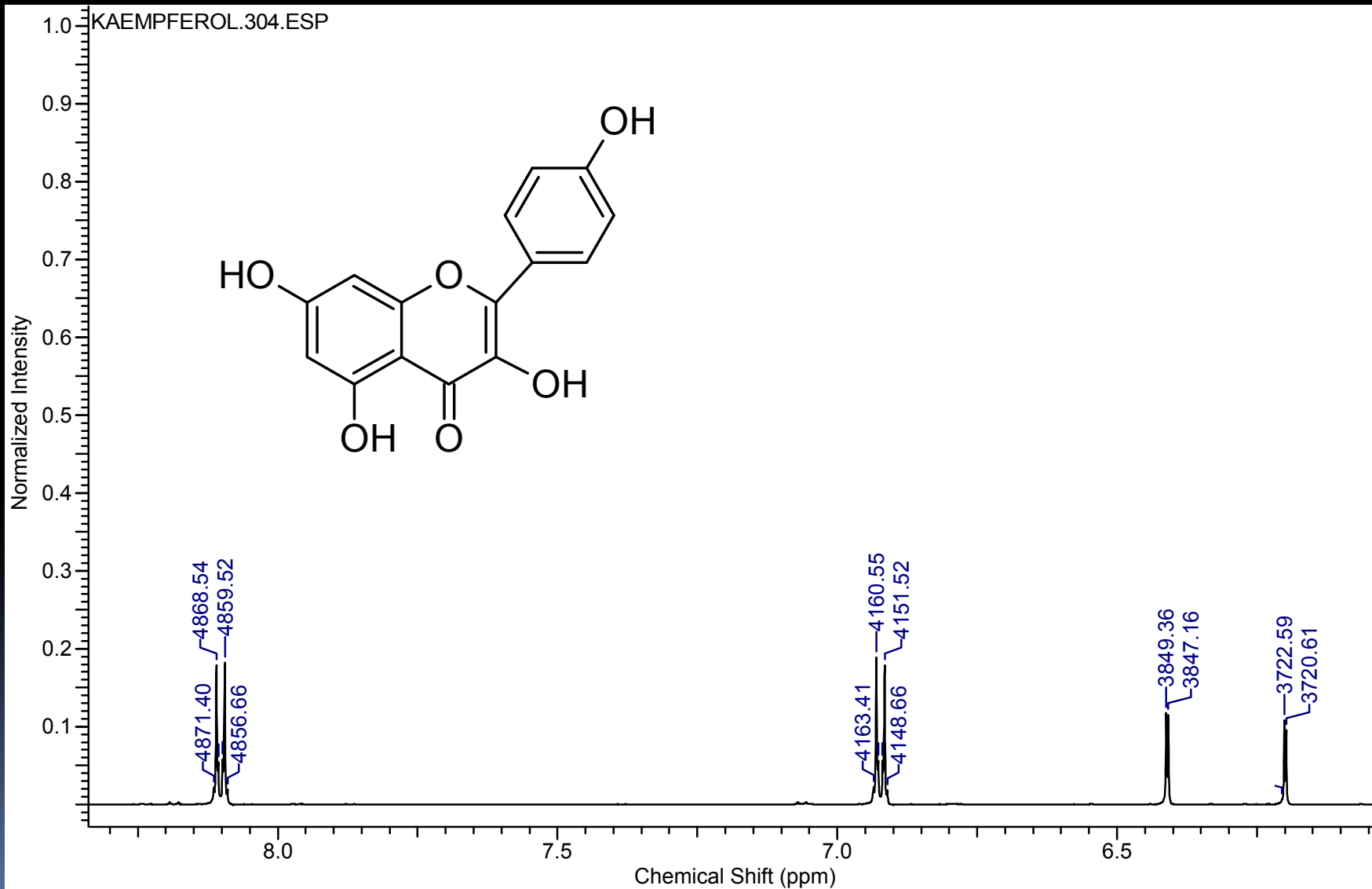


P-OME-CINNAMIC ACID TRANS.361.001.1R.ESP

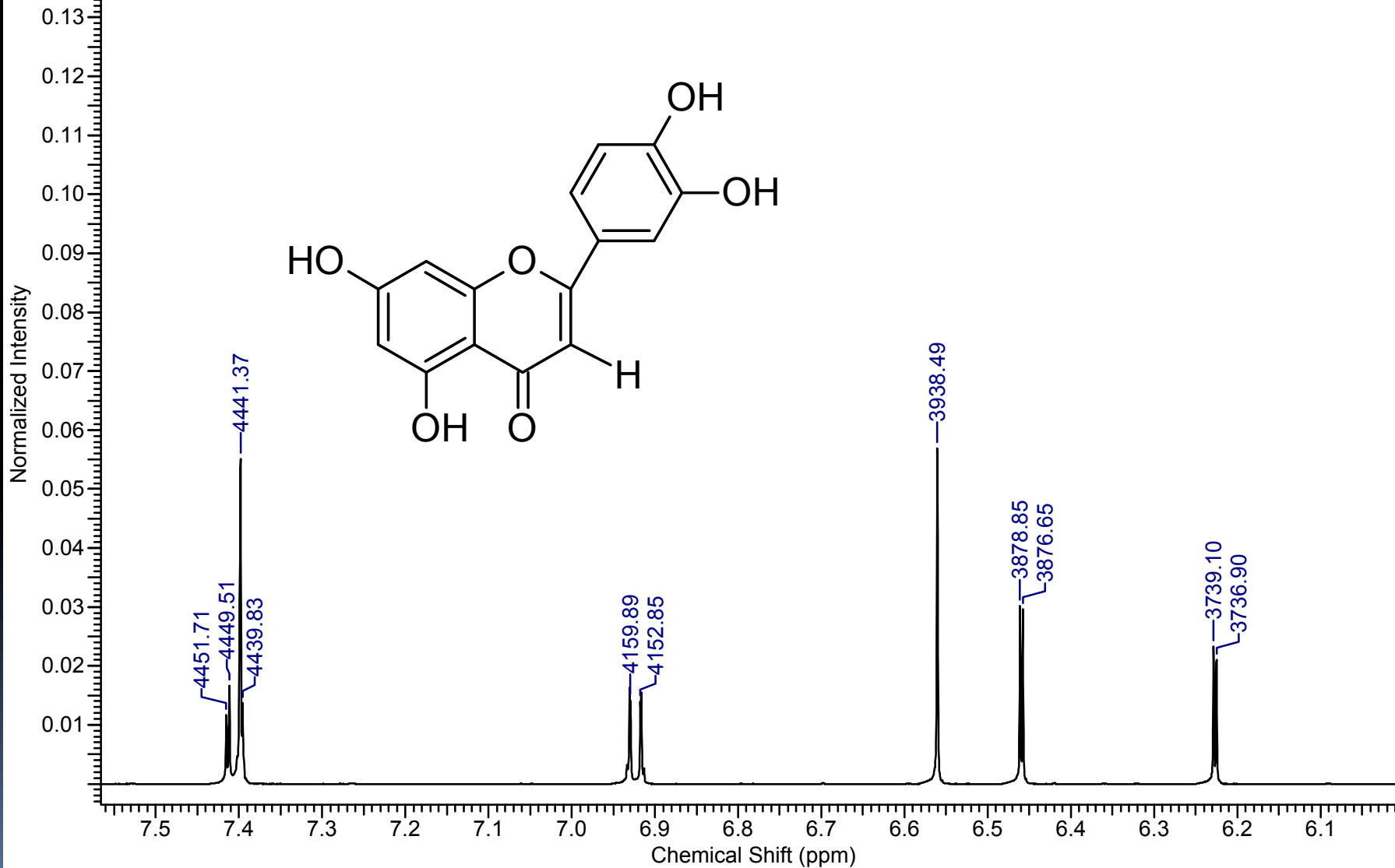




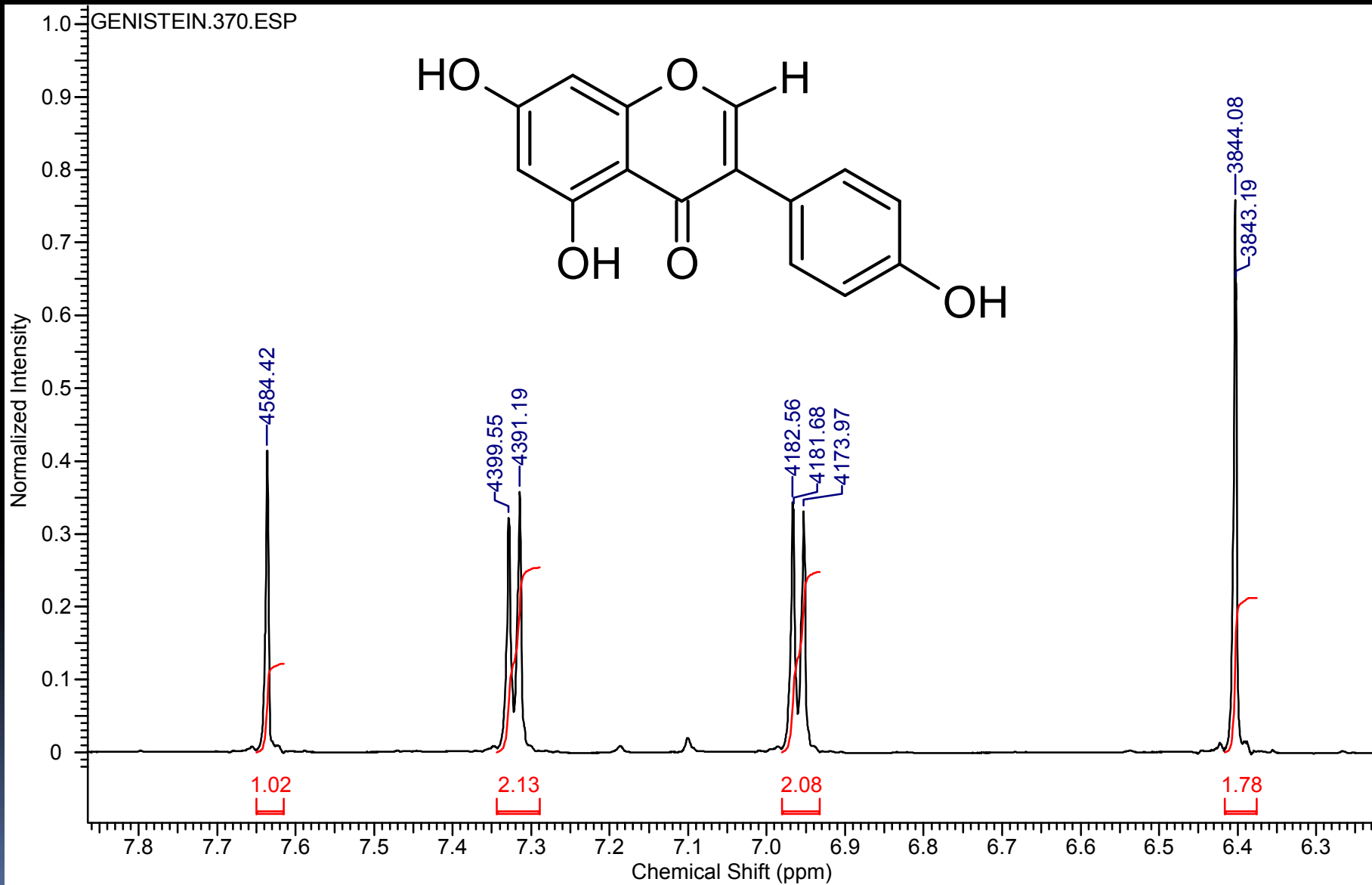
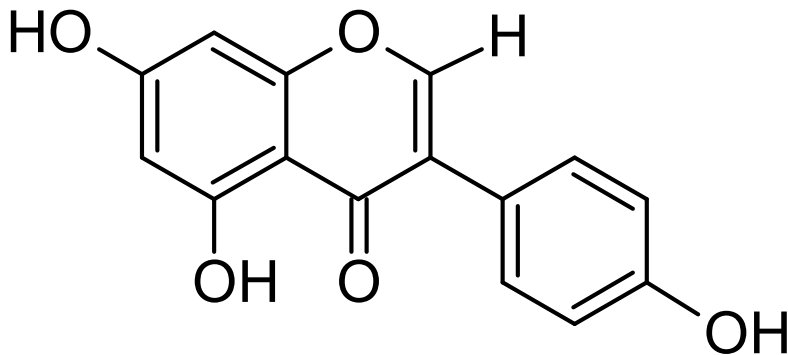




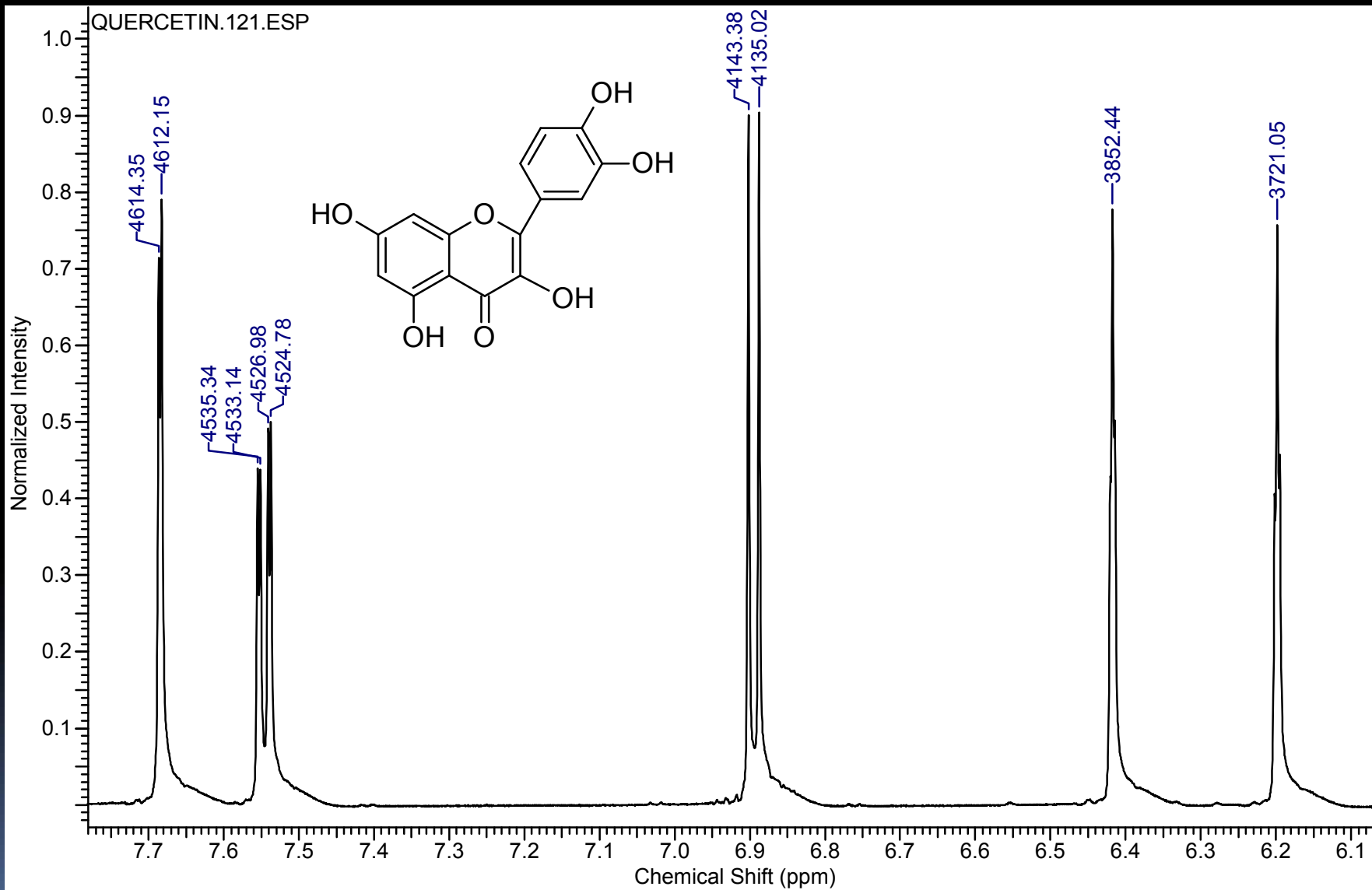
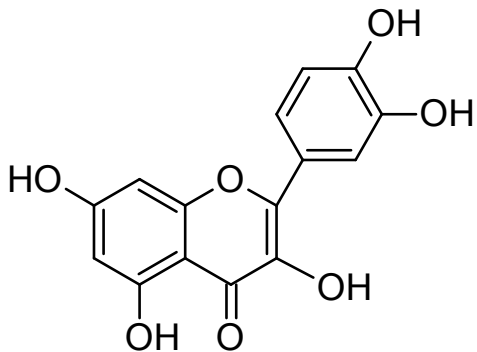
LUTEOLIN.382.ESP



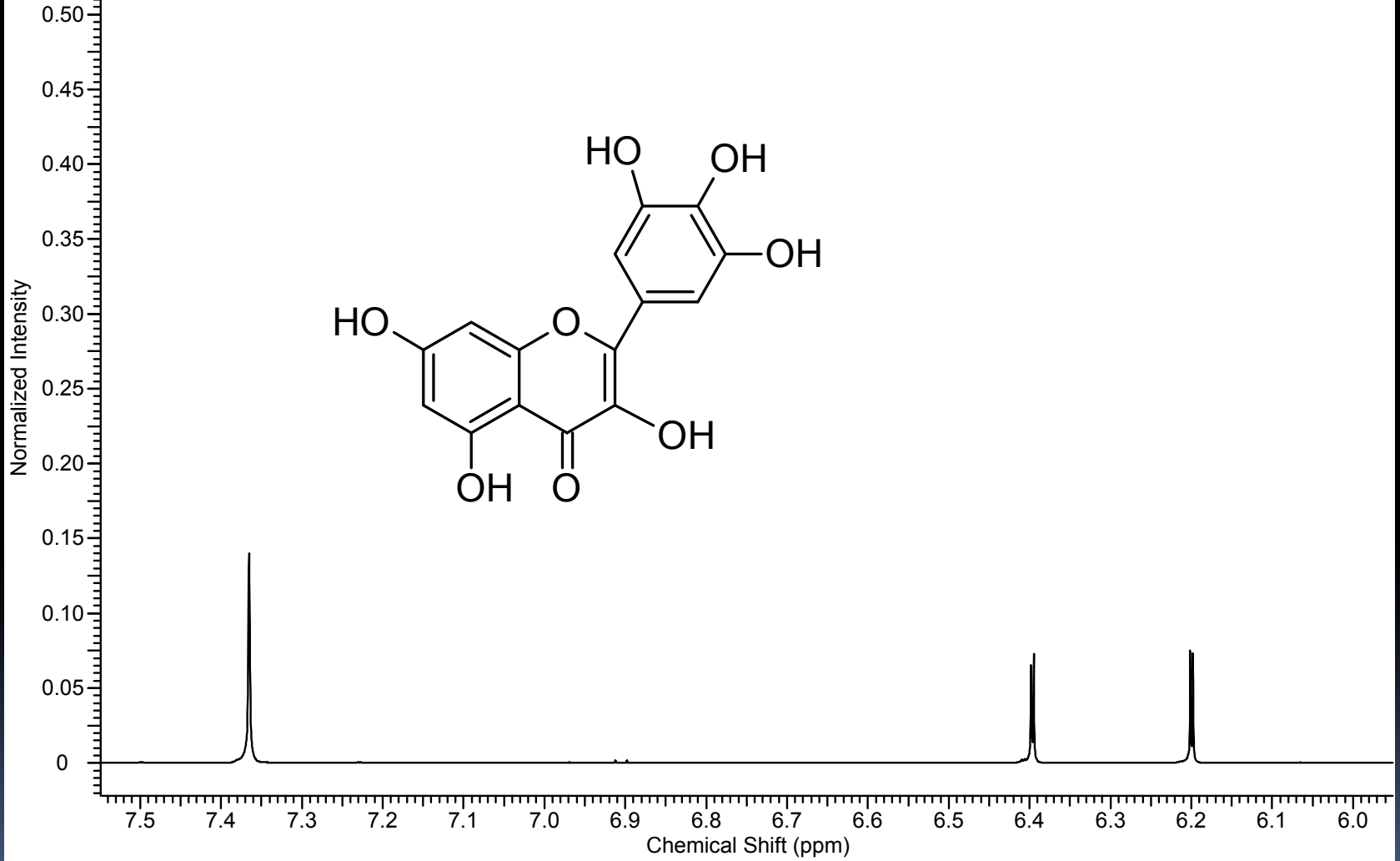
GENISTEIN.370.ESP



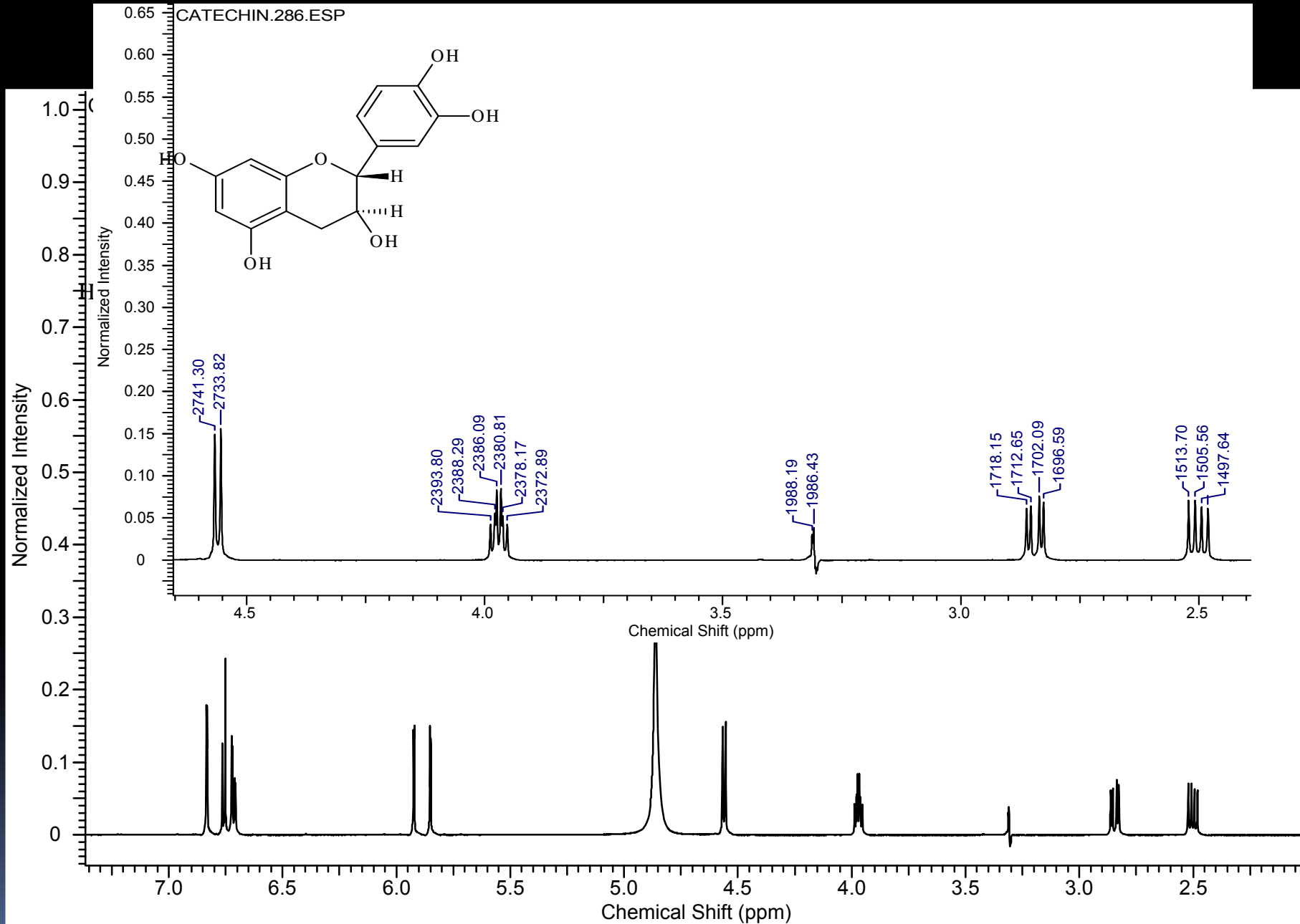
QUERCETIN.121.ESP

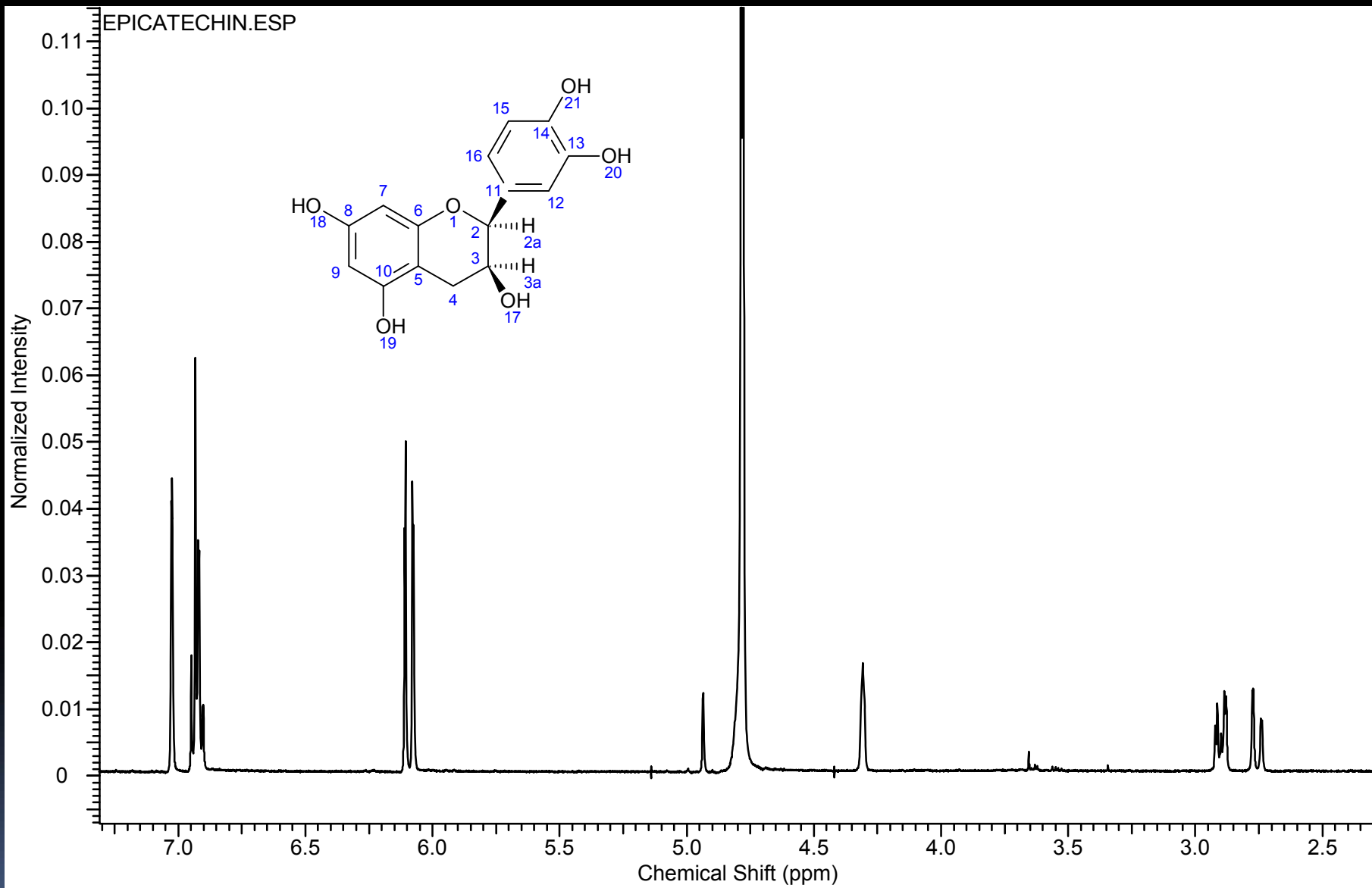


myricetin.391.esp



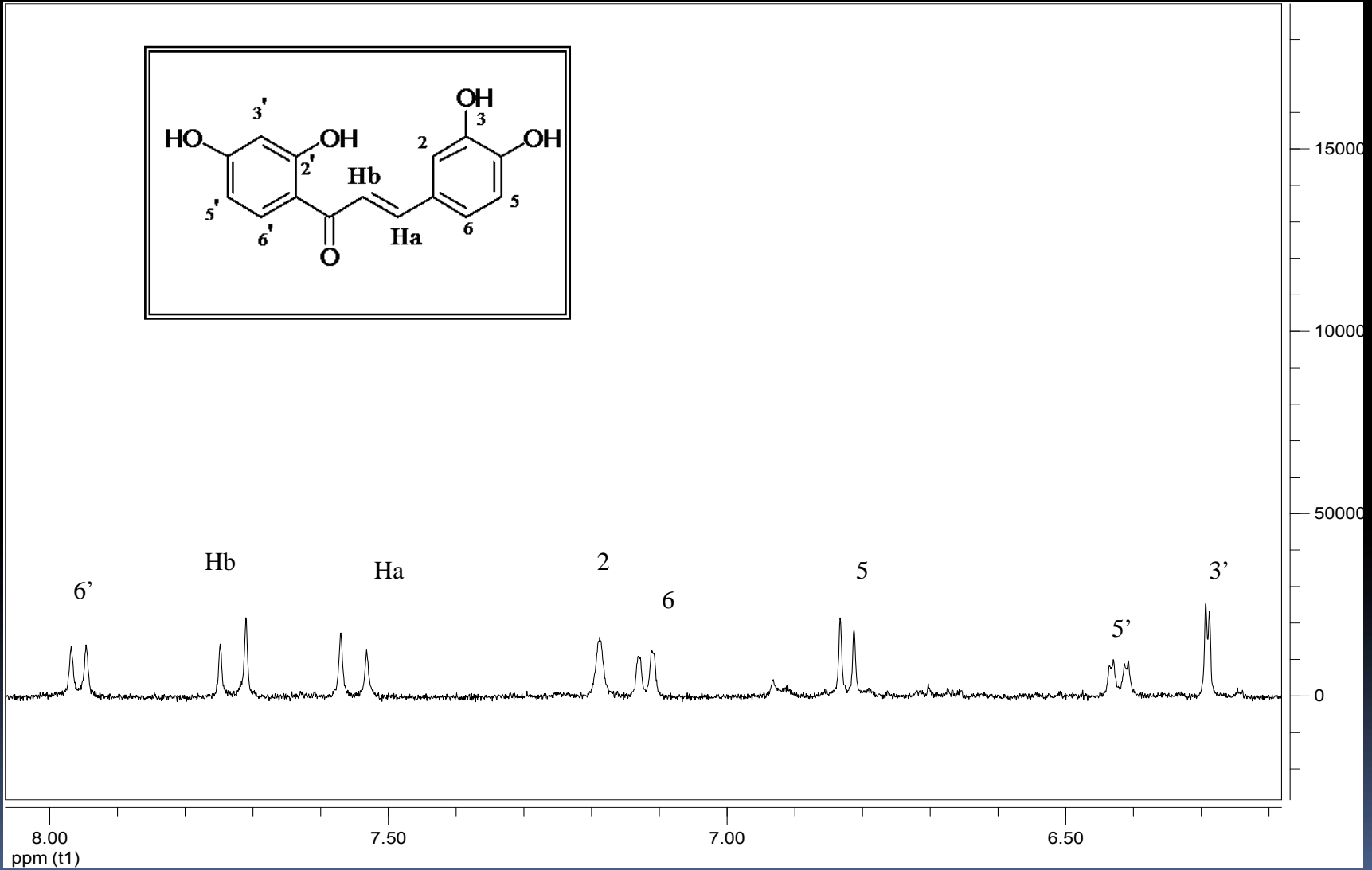
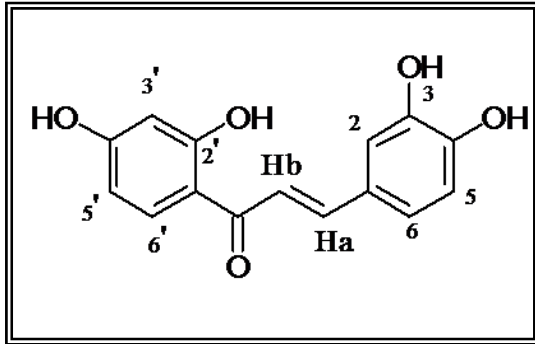
CATECHIN.286.ESP

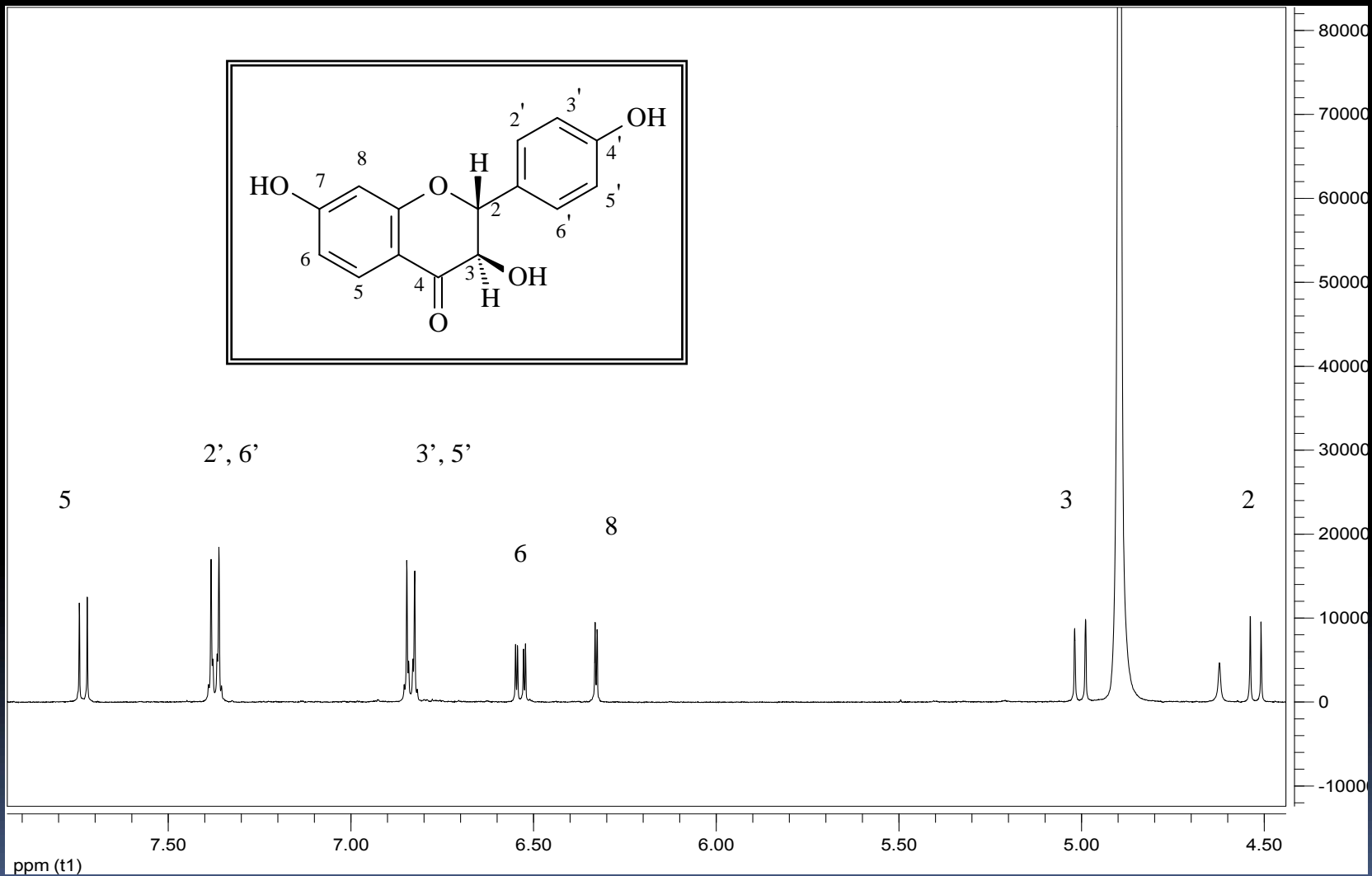
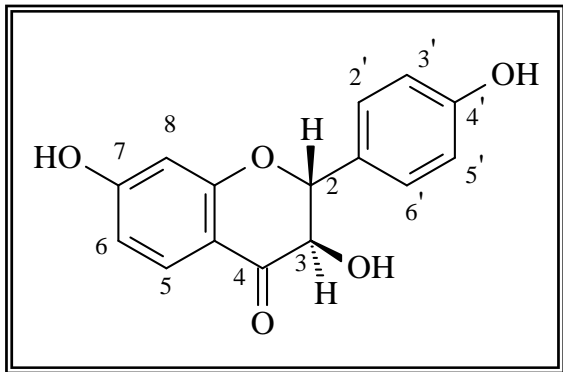


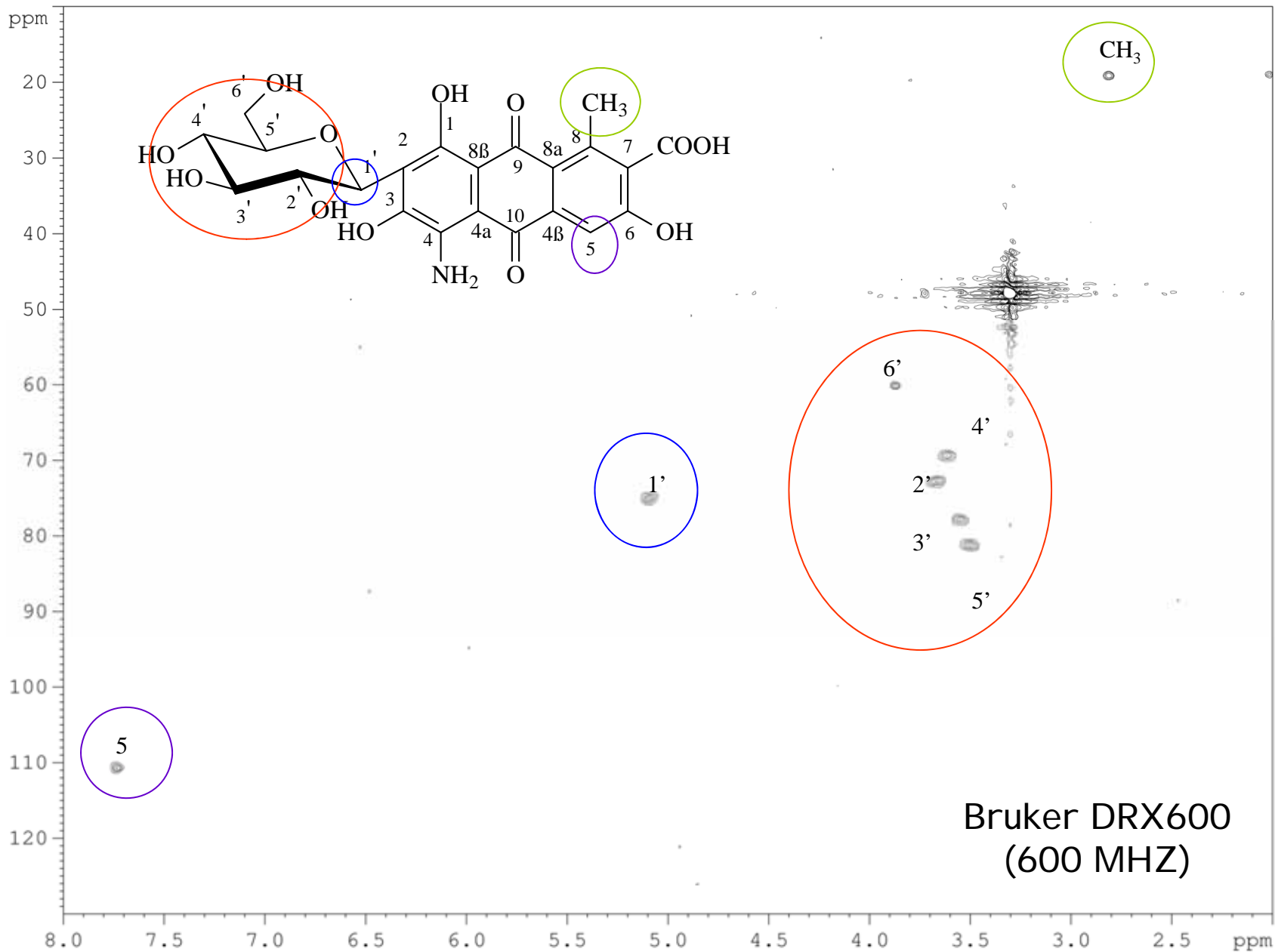




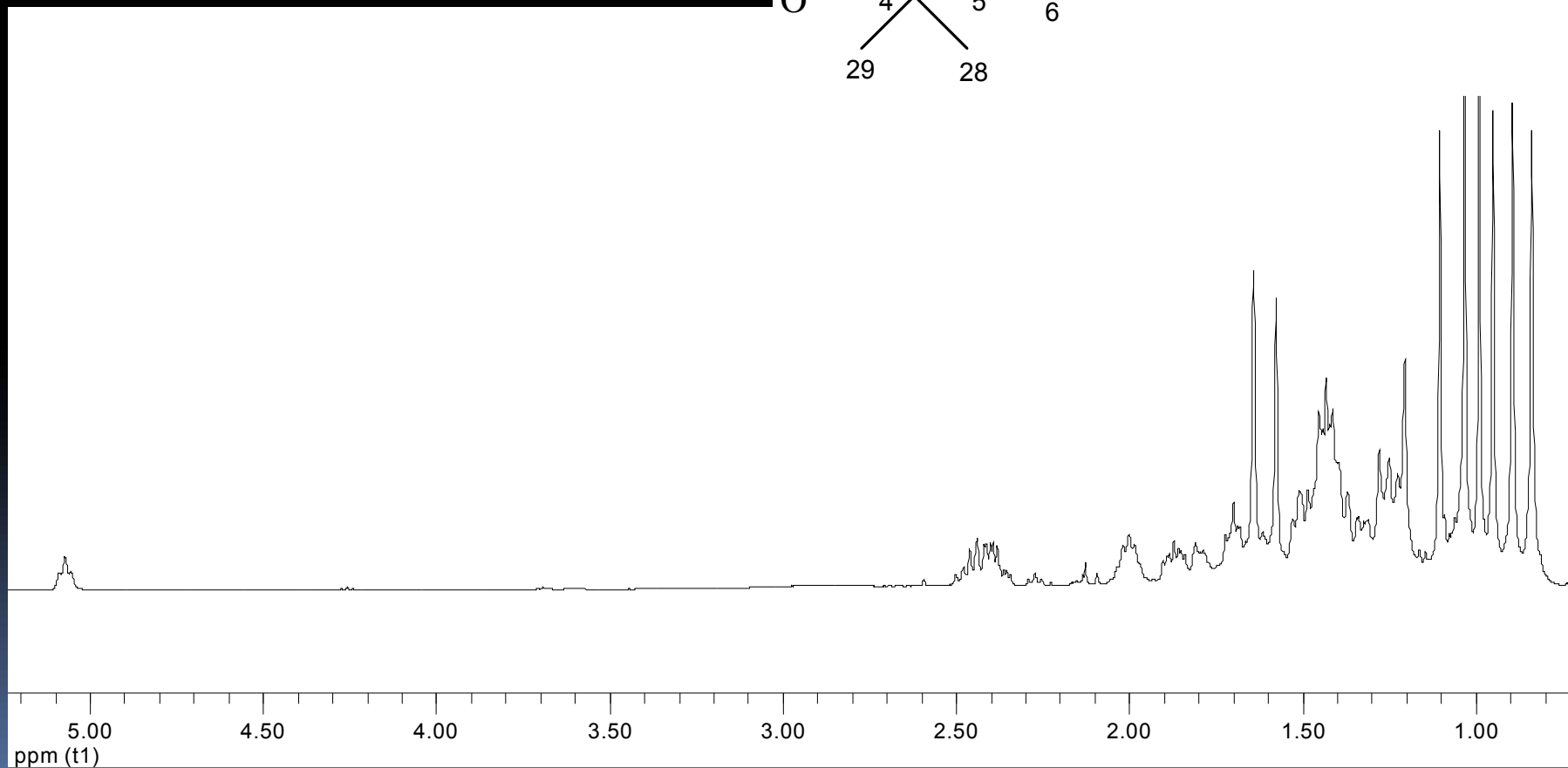
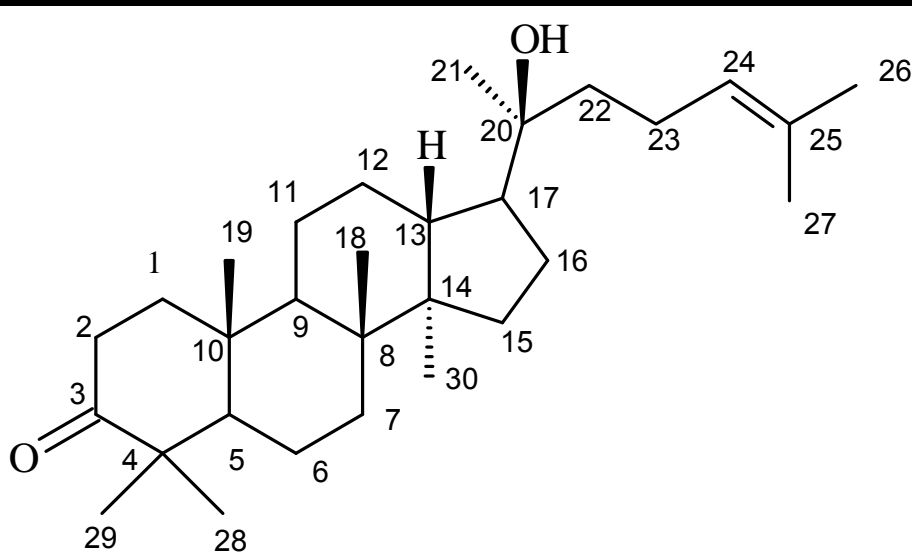
# Χαλκόνες



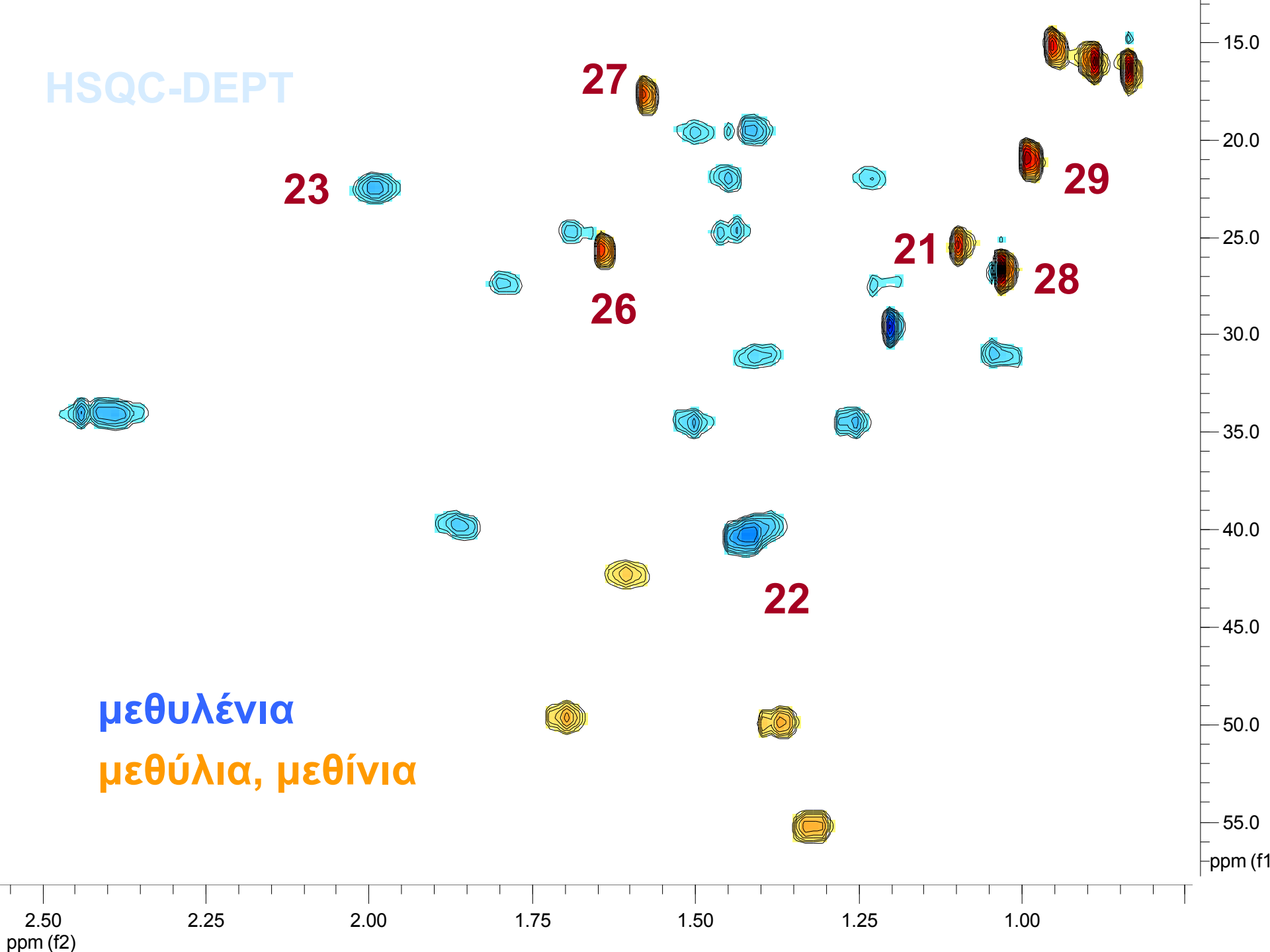


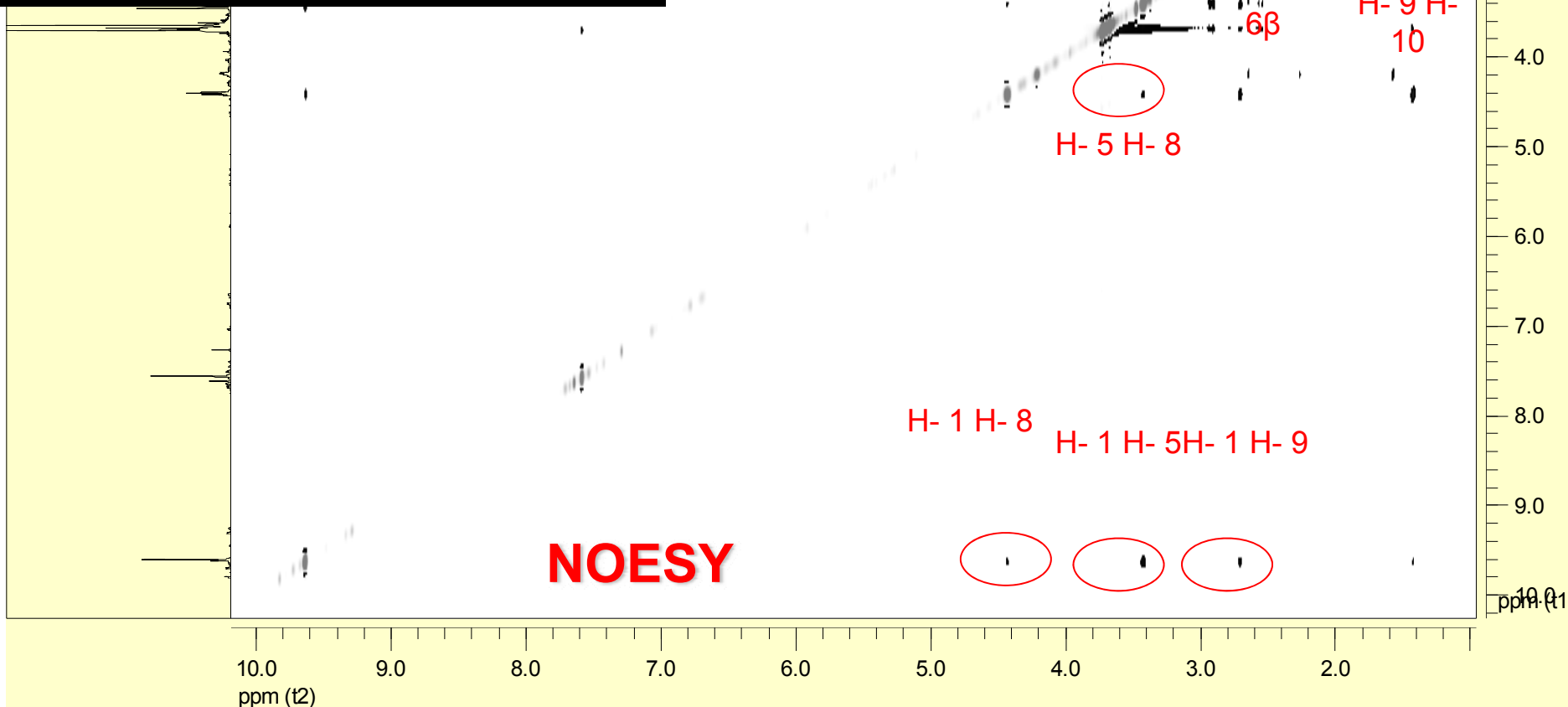
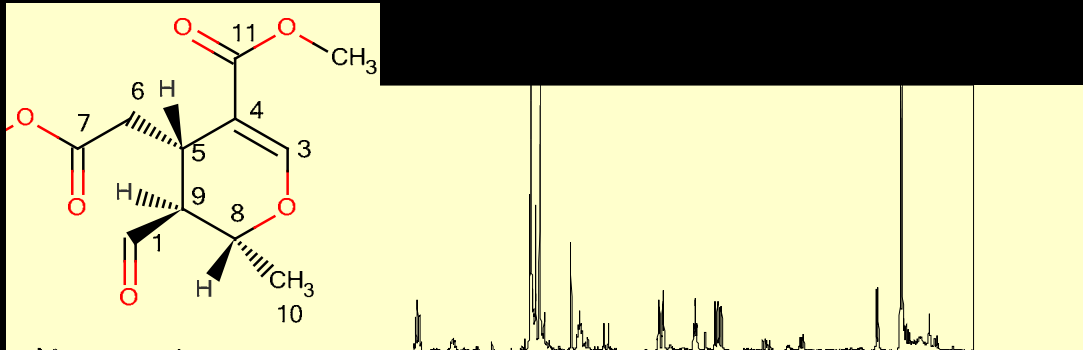
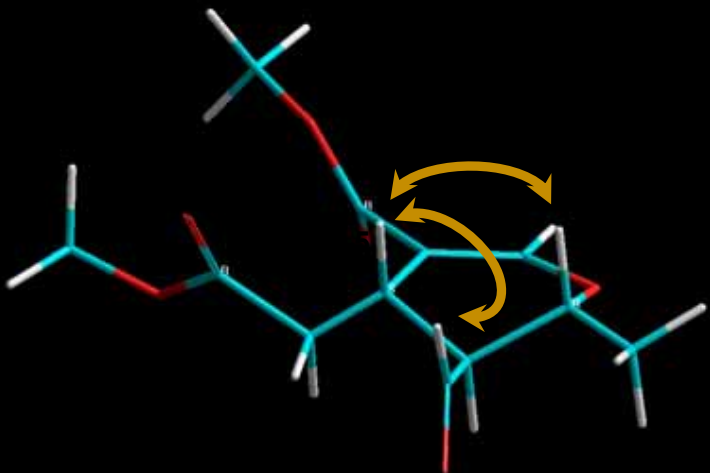


# Hydroxydammarenone II

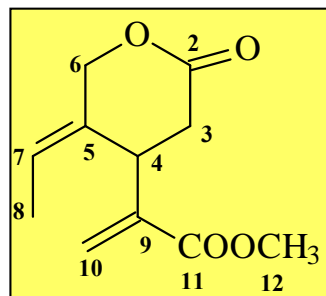


HSQC-DEPT

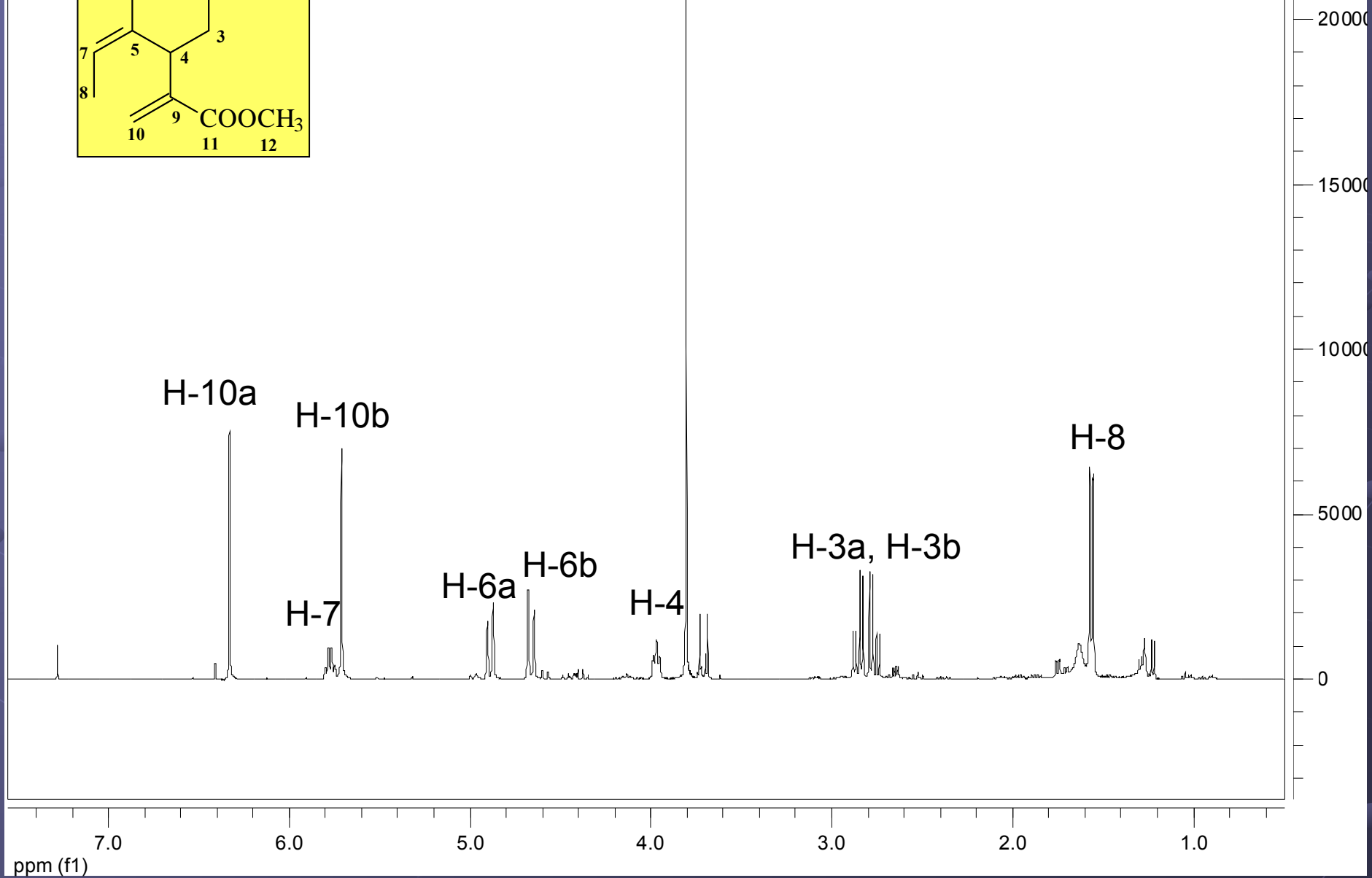




Μεθυλεστέρας του 2-[5-αιθ-(*E*)-υλιδενο-2-οξο-τετραϋδροπυραν-4-υλ] ακρυλικού οξέος - Ολεόνη

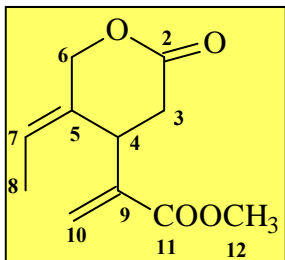


$^1\text{H-NMR}$  ( $\text{CDCl}_3$ )



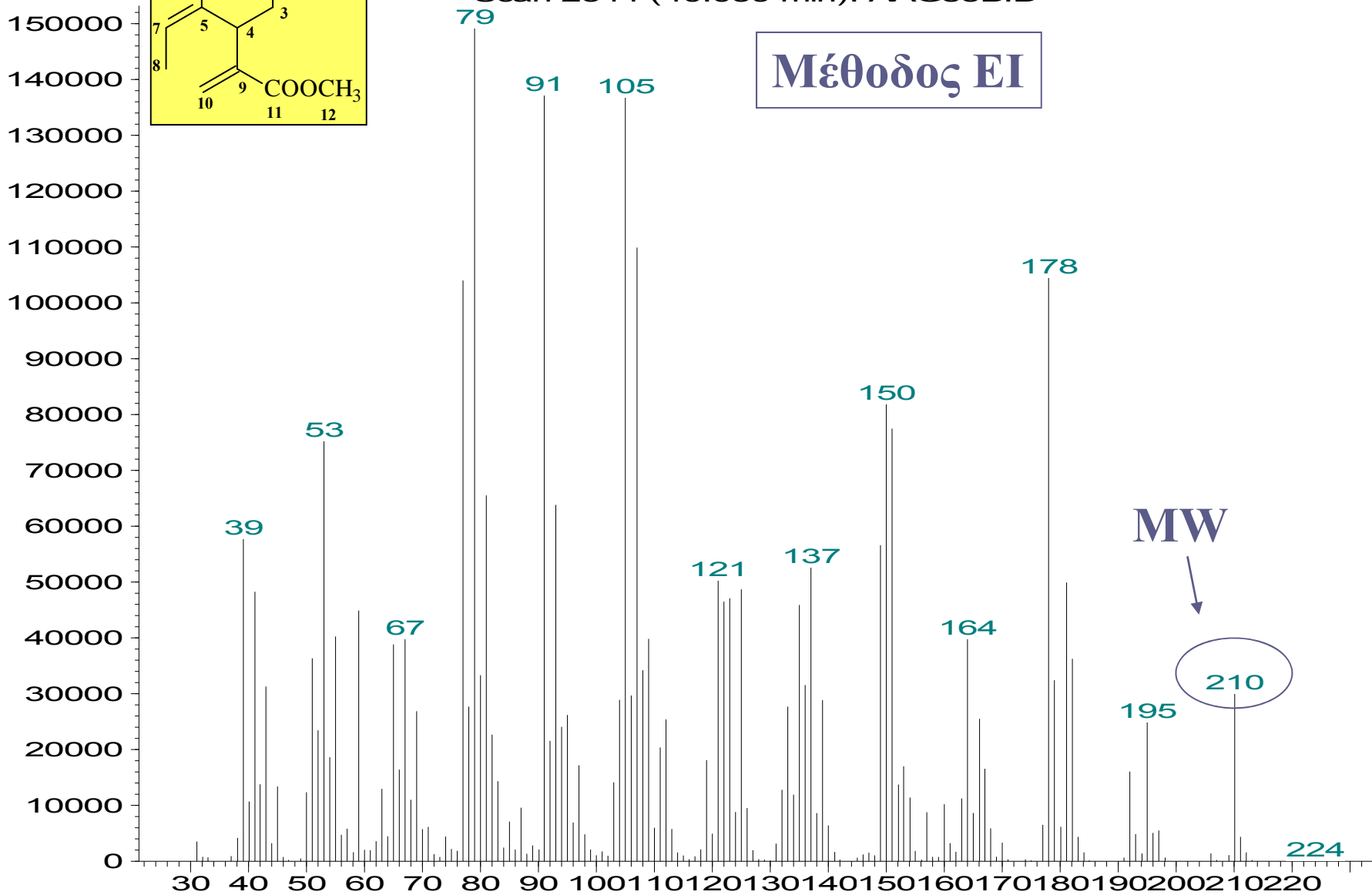
Abundance

Φάσμα MS



Scan 2344 (40.039 min): AAG85B.D

Μέθοδος EI



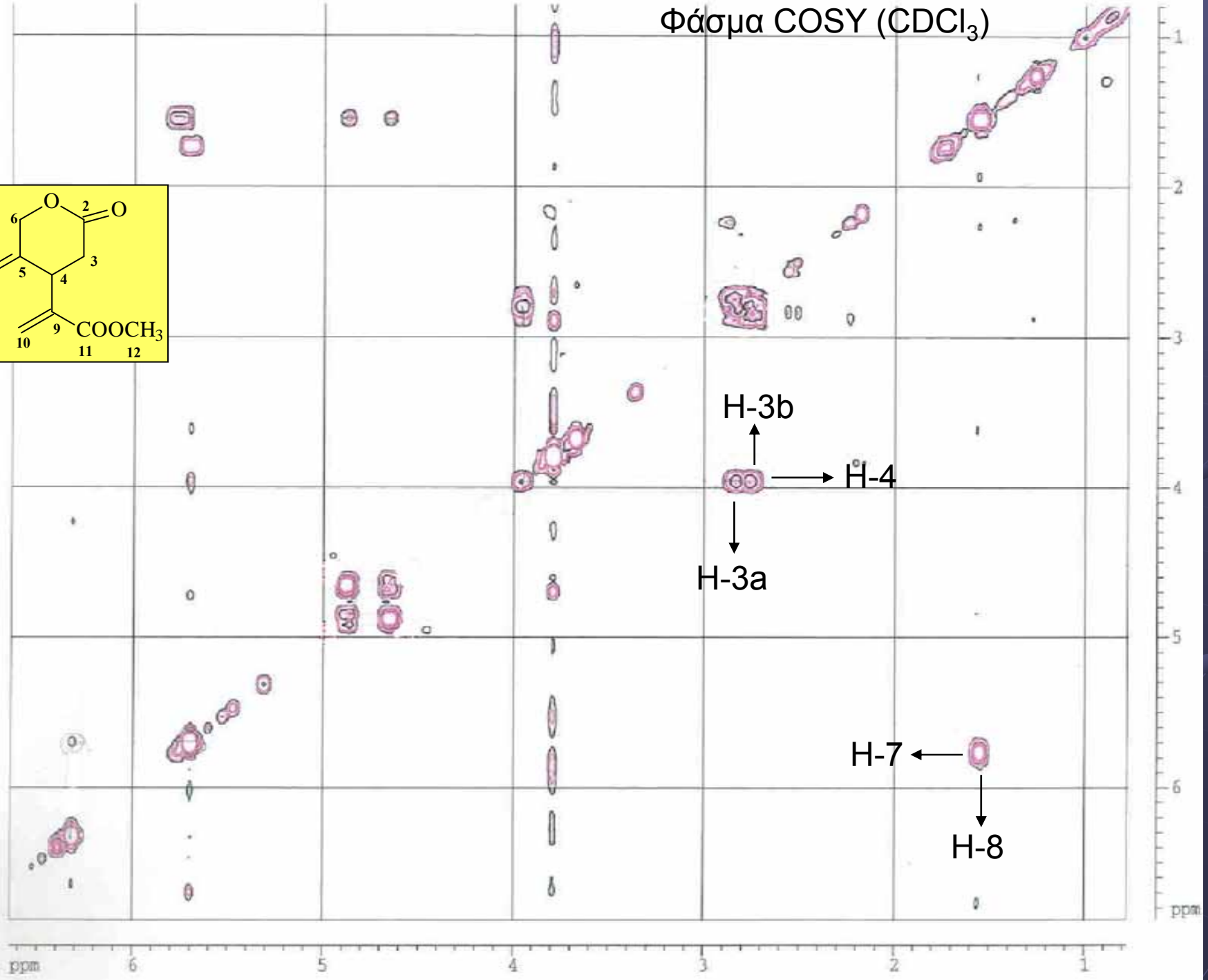
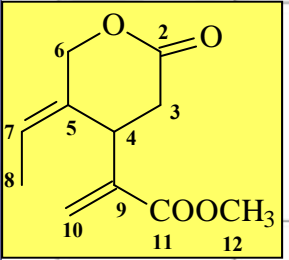
MW

210

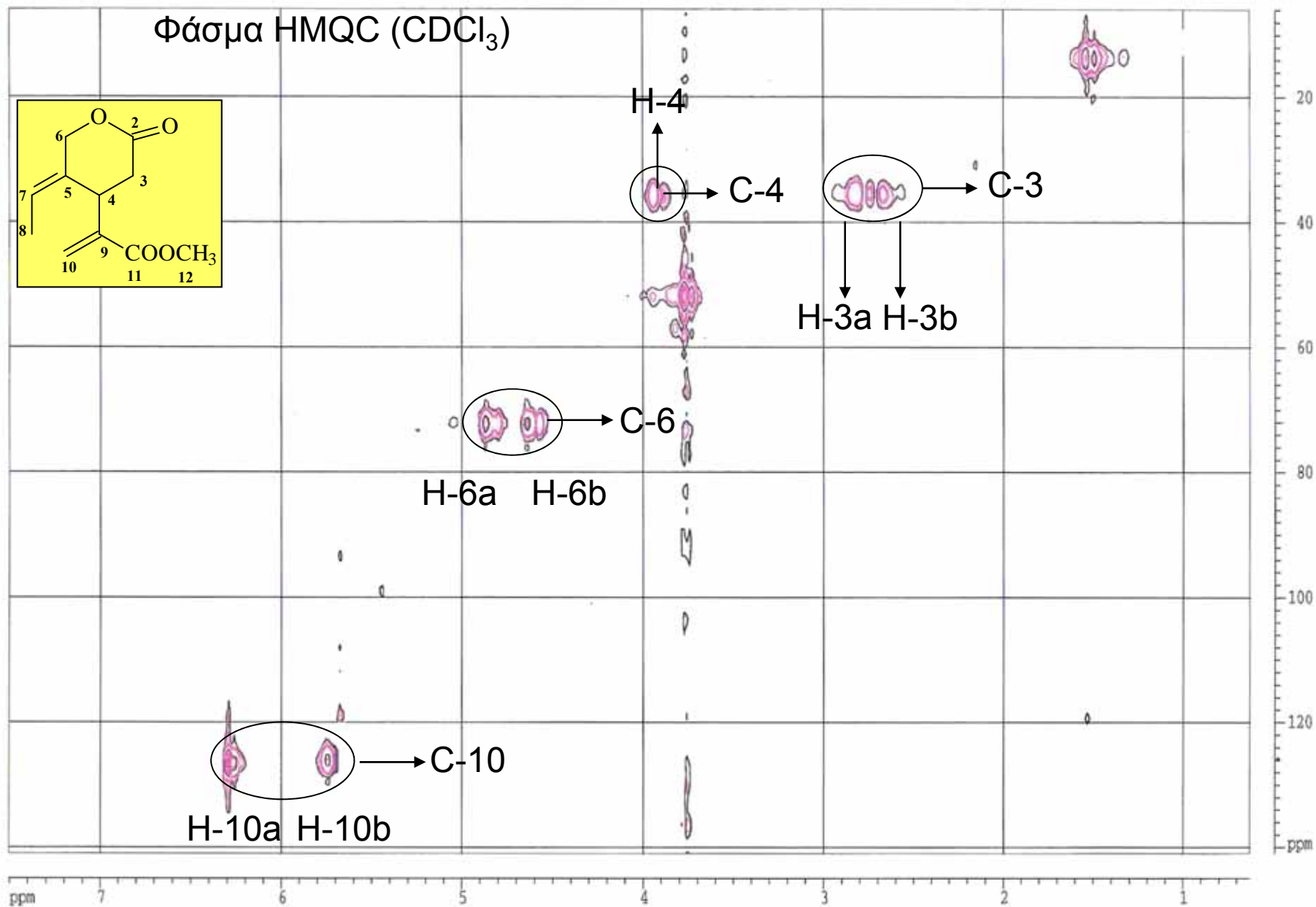
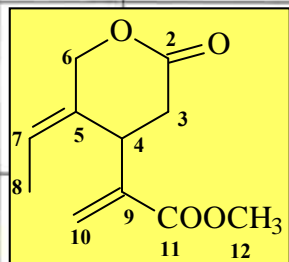
m/z-->



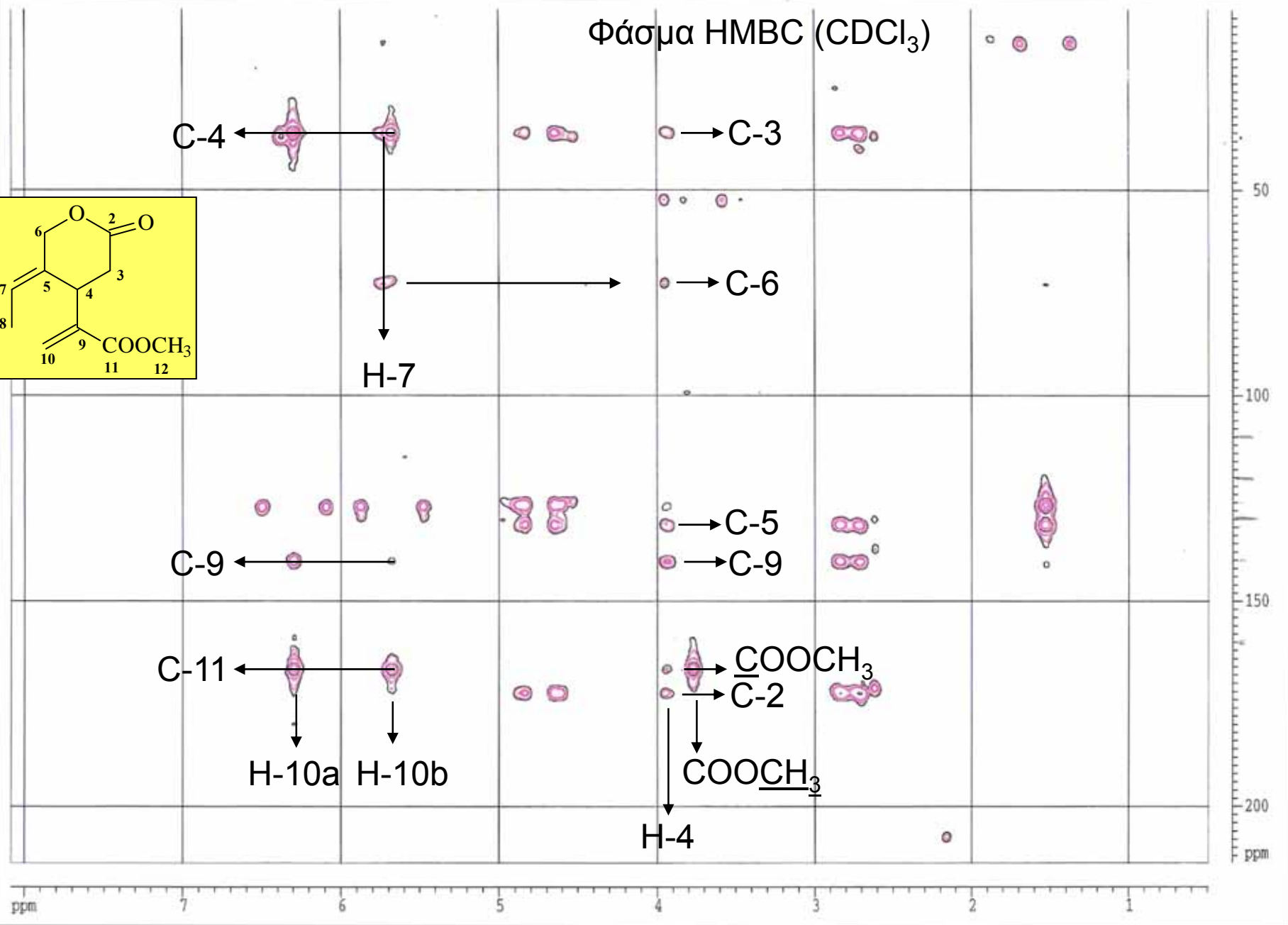
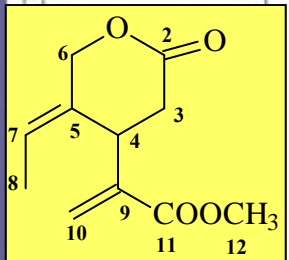
Φάσμα COSY (CDCl<sub>3</sub>)



# Φάσμα HMQC (CDCl<sub>3</sub>)

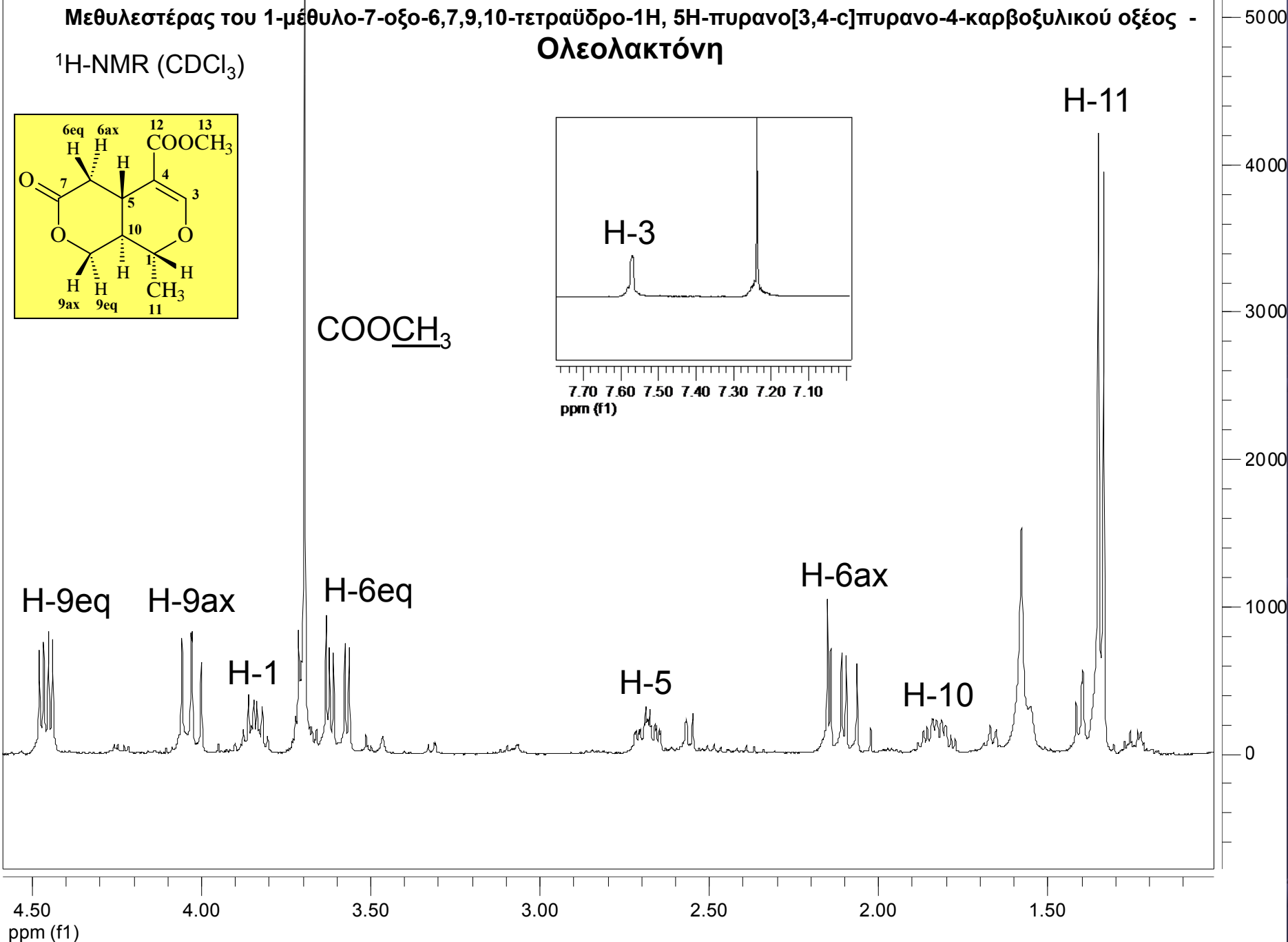
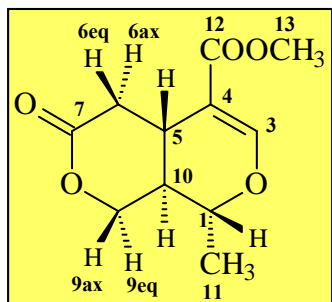


Φάσμα ΗΜΒС (CDCl<sub>3</sub>)

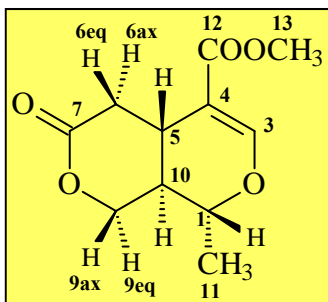


Μεθυλεστέρας του 1-μέθυλο-7-οξο-6,7,9,10-τετραϋδρο-1H, 5H-πυρανο[3,4-c]πυρανο-4-καρβοξυλικού οξέος -  
Ολεολακτόνη

$^1\text{H-NMR}$  ( $\text{CDCl}_3$ )



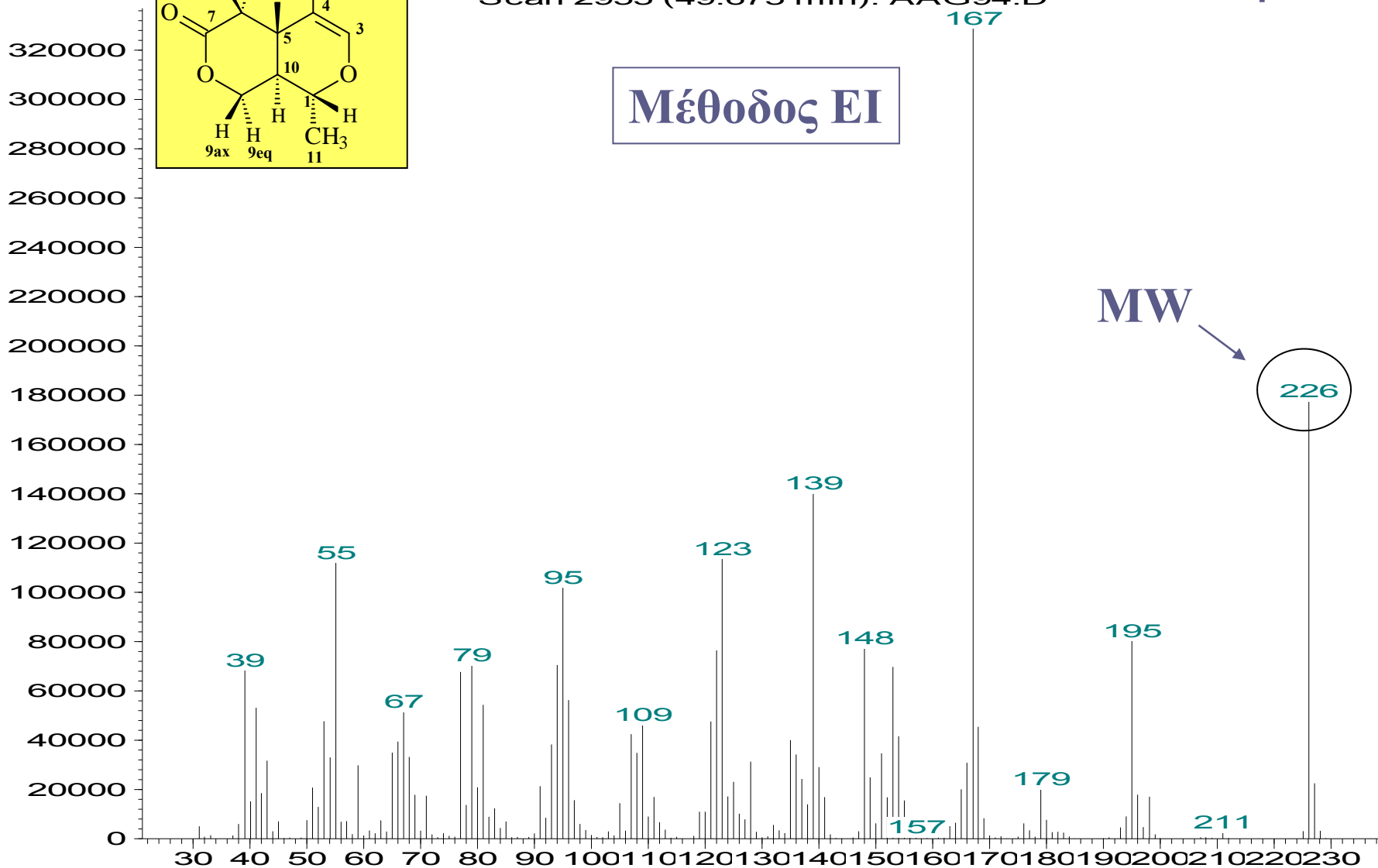
Abundance



Scan 2955 (49.675 min): AAG94.D

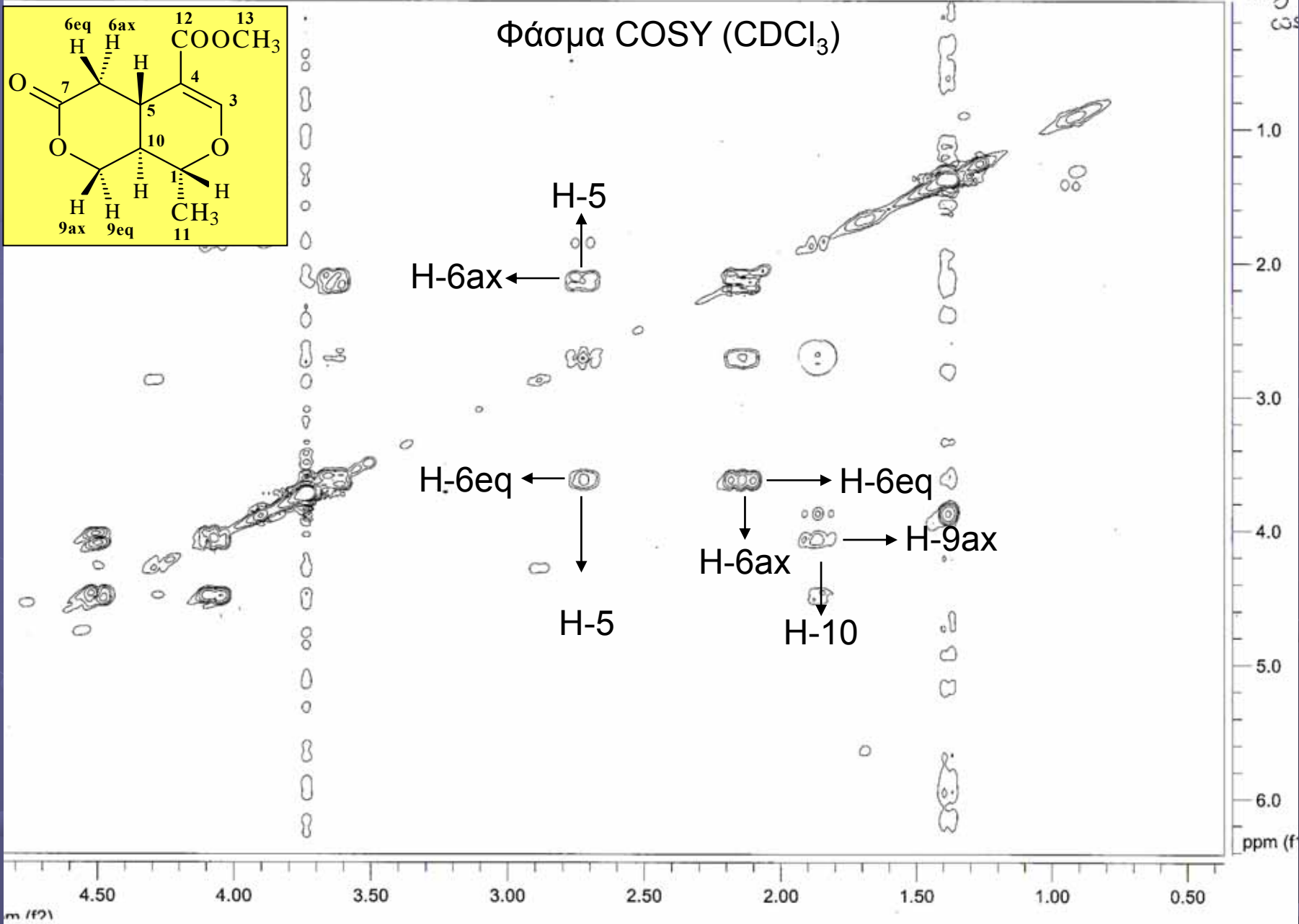
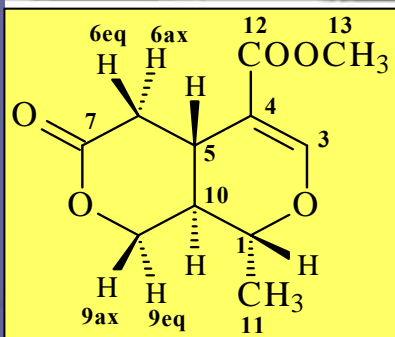
Φάσμα MS

Μέθοδος EI

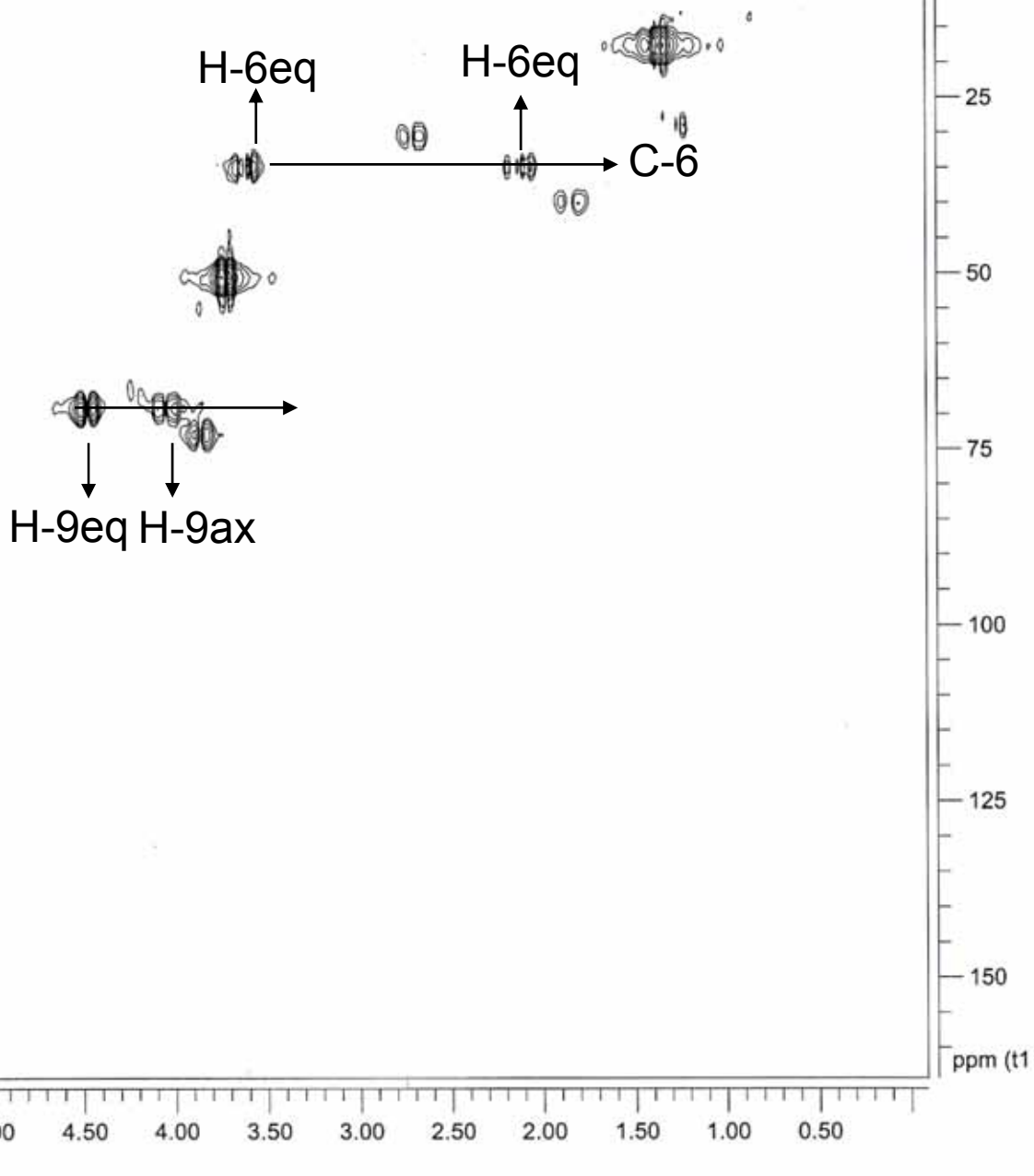
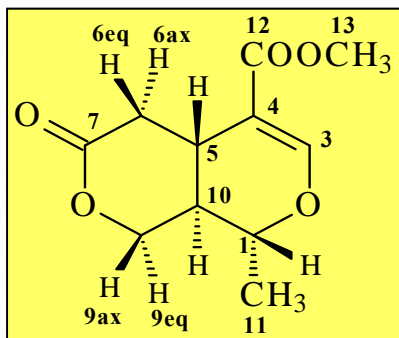


m/z-->

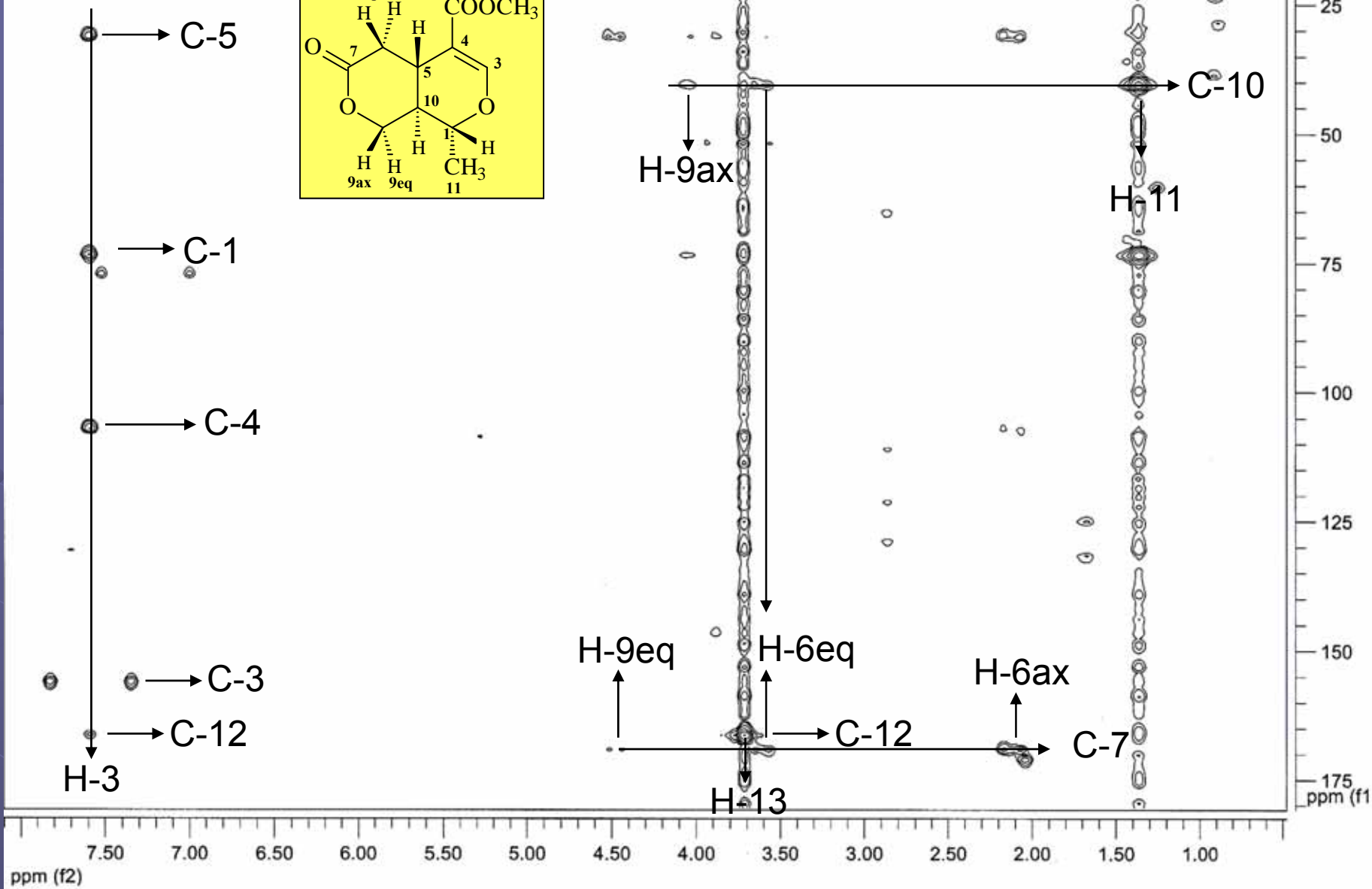
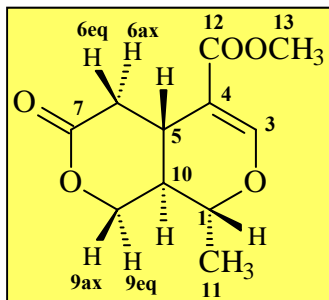
Φάσμα COSY (CDCl<sub>3</sub>)



# Φάσμα ΗΜQC (CDCl<sub>3</sub>)



Φάσμα ΗΜΒС (CDCl<sub>3</sub>)





Φάσμα NOESY (CDCl<sub>3</sub>)

