

A KÉMIA
ÚJABB EREDMÉNYEI

37



AKADÉMIAI KIADÓ • BUDAPEST 1977

DI- ÉS POLISZACHARIDOK TÉRSZERKEZETI KÉRDÉSEI

NÁNÁSI PÁL

a kémiai tudományok doktora

SZEJTLI JÓZSEF

a kémiai tudományok doktora

TARTALOM

Bevezetés	11
1. A konformációelmélet alapjai	14
1.1. A konformáció fogalma.....	14
1.2. A rotációs izoméria alapfogalmai	16
1.3. A gyűrűfeszültség eredete.....	27
1.4. A ciklohexángyűrű	30
1.4.1. Monoszubsztituált ciklohexán	38
1.4.2. Diszubsztituált ciklohexán	39
1.4.3. Többszörösen szubsztituált ciklohexánok.....	51
1.5. A ciklitek konformációi	53
1.6. A szerkezetábrázolás kialakulása a szénhidrátkémiá- ban	55
2. A piranózgyűrűk energetikája	60
2.1. A piranózgyűrű alapkonformációi	60
2.2. A piranózkonformációk nómenklatúrája	67
2.3. A piranózkonformációk leírása	71
2.3.1. Az alapkonvenciók	72
2.3.2. A C 1 konformáció leírása	74
2.3.3. A diszacharidok és a glikozidok konformációjának leírása	78
2.3.4. Egyéb konformációk jelölése	81
2.4. Instabilitási tényezők	86
2.5. Konformációs egyensúlyok és entrópiák	92

2.6.	Konformációs szabadenergiák	101
2.6.1.	Szterikus effektusok	101
2.6.2.	Anomer (dipól) effektusok	109
2.6.3.	A konformációs szabadenergiák számítása	111
2.7.	Energiaszámítás potenciálfüggvényekkel	117
3.	A glikozidos hídatom körüli rotáció energetikája ...	124
3.1.	A monomer egységek konformációja diszacharidokban	124
3.2.	Diszacharid kötés-konformációk	129
3.3.	Diszacharid konformáció-energiatérképek	131
3.3.1.	Maltóz	136
3.3.2.	Cellobióz	139
3.4.	Ciklodextrinek	142
4.	A poliszacharidok konformációviszonyai	148
4.1.	Molekuláris konfigurációtípusok és biológiai funkciók	148
4.2.	Példa az oldott poliszacharidok molekuláris konfigurációjának problémájára: az amilóz	150
4.2.1.	Az oldatok hidrodinamikai sajátosságai	153
4.2.2.	Az oldatok optikai sajátosságai	156
4.2.3.	A jódkomplekxképzés	156
4.2.4.	Az enzimes hidrolízis	159
4.2.5.	A savas hidrolízis nem statisztikus jellege	159
4.2.6.	Az amilózmolekula molekuláris konfigurációátmenetei	167
4.3.	Rotációs dimenziók	170
4.4.	Konformációs-energiatérképek	174
4.4.1.	Hélixparaméterek	176
4.4.2.	Long-range kölcsönhatások	177
4.4.3.	H-kötések	178
4.4.4.	Fontosabb poliszacharidok konformáció-energiatérképei	179
Irodalom	187