



UNIVERSITAT DE
BARCELONA

Non-glycosidic analogues of alpha-galactosylceramide: Design, synthesis and biological activity

Roser Borràs Tudurí

ADVERTIMENT. La consulta d'aquesta tesi queda condicionada a l'acceptació de les següents condicions d'ús: La difusió d'aquesta tesi per mitjà del servei TDX (www.tdx.cat) i a través del Dipòsit Digital de la UB (diposit.ub.edu) ha estat autoritzada pels titulars dels drets de propietat intel·lectual únicament per a usos privats emmarcats en activitats d'investigació i docència. No s'autoritza la seva reproducció amb finalitats de lucre ni la seva difusió i posada a disposició des d'un lloc aliè al servei TDX ni al Dipòsit Digital de la UB. No s'autoritza la presentació del seu contingut en una finestra o marc aliè a TDX o al Dipòsit Digital de la UB (framing). Aquesta reserva de drets afecta tant al resum de presentació de la tesi com als seus continguts. En la utilització o cita de parts de la tesi és obligat indicar el nom de la persona autora.

ADVERTENCIA. La consulta de esta tesis queda condicionada a la aceptación de las siguientes condiciones de uso: La difusión de esta tesis por medio del servicio TDR (www.tdx.cat) y a través del Repositorio Digital de la UB (diposit.ub.edu) ha sido autorizada por los titulares de los derechos de propiedad intelectual únicamente para usos privados enmarcados en actividades de investigación y docencia. No se autoriza su reproducción con finalidades de lucro ni su difusión y puesta a disposición desde un sitio ajeno al servicio TDR o al Repositorio Digital de la UB. No se autoriza la presentación de su contenido en una ventana o marco ajeno a TDR o al Repositorio Digital de la UB (framing). Esta reserva de derechos afecta tanto al resumen de presentación de la tesis como a sus contenidos. En la utilización o cita de partes de la tesis es obligado indicar el nombre de la persona autora.

WARNING. On having consulted this thesis you're accepting the following use conditions: Spreading this thesis by the TDX (www.tdx.cat) service and by the UB Digital Repository (diposit.ub.edu) has been authorized by the titular of the intellectual property rights only for private uses placed in investigation and teaching activities. Reproduction with lucrative aims is not authorized nor its spreading and availability from a site foreign to the TDX service or to the UB Digital Repository. Introducing its content in a window or frame foreign to the TDX service or to the UB Digital Repository is not authorized (framing). Those rights affect to the presentation summary of the thesis as well as to its contents. In the using or citation of parts of the thesis it's obliged to indicate the name of the author.

ANNEX 3. Results of Induced Fit docking studies

	Dockings		Induced Fit results			
	Mean DS	Pose mark	Mean DS	DS	Pose mark	Interactions
DS-1	-6,492	g	-5,840	-5,934	r	Asp80 x2, Thr156
				-5,572	r	Asp80 x2, Thr156
				-6,013	b	Asp80 x2, Thr156
DS-3	-6,259	r	-5,828	-6,064	b	Asp80 x2, Thr156, Met69
				-5,867	r	Asp80 x2, Thr156, Thr156 amide
				-5,553	b	Asp80 x2, Thr156, Met69
DS-14	-8,566	g	-7,459	-7,705	b	Asp80 x2, Thr156, Asp29 _{TCRa}
				-7,497	b	Asp80 x2, Thr156, Asp29 _{TCRa}
				-7,461	b	Asp80 x2, Thr156, Asp29 _{TCRa}
				-7,499	r	Asp80 x2, Thr156, Asp153,
				-7,482	r	Asp80 x2, Thr156, Asp153,
				-7,498	b	Asp80 x2, Thr156, Asp29 _{TCRa}
				-7,073	r	Asp80 x2, Thr156, Asp153,
DS-15	-5,676	g	-5,456	-6,56	b	Asp80 x2, Thr156, Thr156 NH2 sulfonamide, Thr159 NH2 sulfonamide
				-5,836	r	Asp80 x2, Thr156, Asp153
				-6,254	r	Asp80 x2, Thr156, Asp153
				-5,683	g	Asp80 x2, Thr156, Asp153
				-5,58	g	Asp80 x2, Thr156, Asp153
				-5,98	g	Asp80 x2, Thr156, Asp153, Gly96 TCRa, Arg95 TCRa
				-5,764	g	Asp80 x2, Thr156, Asp153 x2
				-5,407	r	Asp80 x2, Thr156, Asp94 TCRa
				-5,392	r	Asp80 x2, Thr156
				-5,403	r	Asp80 x2, Thr156, Asp153
				-5,166	r	Asp80 x2, Thr156, Asp153
				-4,851	r	Asp80 x2, Thr156, Asp153
				-5,31	g	Asp80 x2, Thr156, Asp153
-5,325	g	Asp80 x2, Thr156, Asp153				
-4,817	g	Asp80 x2, Thr156, Asp154				

Dockings		Induced Fit results			
Mean DS	Pose mark	Mean DS	DS	Pose mark	Interactions
			-5,245	g	Asp80 x2, Thr156, Asp155
			-5,192	g	Asp80 x2, Thr156, Asp156
			-5,049	g	Asp80 x2, Thr156, Asp157
			-4,848	b	Asp80 x2, Thr156, Asp94 TCRA
DS-21			-7,523	b	Asp80 x2, Thr156, Asp29TCRA
	-6,023	r	-5,997	r	Asp80 x2, Thr156, Lys68 (pi-cat) TCRA
DS-21			-5,79	g	Asp80 x2, Thr156
			-4,923	g	Asp80 x2, Thr156
DS-28	-8,327	g			No Results
			-9,254	b	Asp80 x2, Thr156, Asp29 TCRA, Thr27 TCRA, Lys71 TCRA, Lys71 TCRA sb
			-8,905	r	Asp80 x2, Thr156, Thr27 TCRA, Lys71 TCRA, Lys71 TCRA sb
			-8,763	g	Asp80 x2, Thr156, Asp153, Asn30 TCRA, Lys68 TCRA, Gln52 TCRA
			-7,833	r	Asp80 x2, Thr156, Asn30 TCRA, Gln52 TCRA, Lys71 TCRA, Lys71 TCRA sb
			-8,395	g	Asp80 x2, Thr156, Glu96 TCRA, Asn30 TCRA, Lys68 sb, Gln52 TCRA
			-8,524	g	Asp80 x2, Thr156, Asp153, Gly96 TCRA, Lys68 TCRA, Lys68 TCRA sb, Gln52 TCRA
			-8,423	r	Asp80 x2, Thr156, Asp29 TCRA, Thr27 TCRA, Lys71 TCRA, Lys71 TCRA sb
			-7,917	g	Asp80 x2, Thr156, Lys65 pi-cat, Asn30 TCRA, Gln52 TCRA, Lys71 TCRA, Lys71 TCRA sb,
DS-29	-8,331	b	-6,812	g	Asp80 x2, Thr156, Lys65 pi-cat, Asp153, Asn30 TCRA, Gln52 TCRA, Lys71 TCRA sb,
			-8,109	r	Asp80 x2, Thr156, Glu96 TCRA, Lys68 TCRA sb, Gln52 TCRA
			-7,623	r	Asp80 x2, Thr156, Lys65 sb, Asn30 TCRA
			-7,552	b	Asp80 x2, Thr156, Met69, Lys65 TCRA sb
			-6,938	g	Asp80 x2, Thr156, Lys65 TCRA pi-cat, Gln52 TCRA, Asp29 TCRA
			-7,349	r	Asp80 x2, Thr156, Asn30 TCRA, Gln52 TCRA, Lys71 TCRA, Lys68 TCRA sb
			-7,047	r	Asp80 x2, Thr156, Asn30 TCRA, Lys68 TCRA, Lys68 TCRA sb
			-5,664	b	Asp80 x2, Thr156, Asp94 TCRA
			-4,672	b	Asp80 x2, Thr156, Lys71 TCRA, Lys71 TCRA sb
DS-32	-7,312	r	-6,812	b	Asp80 x2, Thr156, Met69
			-6,783	r	Asp80 x2, Thr156, Asp153, Asp29 TCRA, Lys71 TCRA pi-cat, Gln52 TCRA
DS-39	-7,587	r	-8,528	b	Asp80 x2, Thr156, Thr159, Lys65

	Dockings		Induced Fit results			
	Mean DS	Pose mark	Mean DS	DS	Pose mark	Interactions
DS-46	-7,841	g	-7,512	-7,512	b	Asp80 x2, Thr156, Asp29TCRa x2, Asp29TCRa sb, Lys71TCRa sb
				-8,238	g	Asp80 x2, Thr156, Asp153 x2, Gly96 TCRa
				-7,508	r	Asp80 x2, Thr156, Asp153 x2, Gly96 TCRa
HS44	-8,045	g	-7,298	-6,932	g	Asp80 x2, Thr156, Asp153, Asn30 TCRa
				-6,513	g	Asp80 x2, Thr156, Asp153, Asn30 TCRa