

Abstrakt: L-3,4-dihydroxyfenylalanin (L-DOPA, levodopa) se používá jako léčba Parkinsonovy choroby. V poslední době bylo zjištěno, že některé z jejich deuterovaných analogů vykazují při léčbě vyšší účinnost a mohly by ji v léčbě nahradit. Předmětem této práce bylo studium levodopy a jejích deuterovaných derivátů pomocí vibrační spektroskopie (Raman, ROA, IR a VCD) a porovnání experimentálních výsledků s kvantově mechanickými simulacemi spekter. ROA a VCD jsou chiroptické metody, proto jsou vhodné pro měření chirálních molekul, mezi které L DOPA skutečně patří. Díky kvantově chemickým výpočtům, které poskytly spektra s velmi dobrou shodou s experimentem, jsme dokázali přiřadit experimentální spektrální pásy k jednotlivým vibračním módům levodopy. Použití chiroptických metod (hlavně ROA) umožnilo určení absolutní konfigurace dvakrát deuterovaného derivátu levodopy,  $\alpha,\beta$ -D<sub>2</sub>-L-DOPA. Bylo prokázáno, že se vyskytuje ve formě (*S*- $\alpha$ ,*S*- $\beta$ )-enantiomeru.