

Heterociklusok és sztereokémia kutatócsoport

Prof. Dr. Kurtán Tibor a kutatócsoport vezetője

Dr. Kicsák Máté

Király Sándor Balázs

Dr. Kiss Attila

Dr. Kónya Krisztina

Kónya-Ábrahám Anita

Dr. Mándi Attila

A természetes eredetű O-heterociklusos vegyületek egyik farmakológiailag is értékes csoportját a flavonoidok és rokon vegyületek alkotják, melynek kutatása a DE Szerves Kémiai Tanszékén jelentős hagyományokra tekint vissza. Ehhez kapcsolódva a „Heterociklusok és sztereokémia” kutatócsoport királis, benzol-kondenzált O-, N- és O,N-heterociklusok (pterokarpánok, flavanon analógok, izokrománok, tetrahidroizokinolinok) sztereoselektív szintézisével és az előállított származékok sztereokémiai és farmakológiai vizsgálatával (sejtosztódásgátló hatás, idegsejtvédő hatás, PTP1B gátló hatás, antioxidáns és antifungális hatás) foglalkozik. Célunk új kondenzált heterociklusos alapvázak sztereoselektív előállítása és a hozzájuk kapcsolódó bioaktivitás azonosítása. Vizsgálni kívánjuk a hatás-szerkezet összefüggéseket az alapváz szubsztitúciós mintázata és sztereokémiája vonatkozásában. Többlépéses domino gyűrűzárási reakciókat alkalmazunk új kondenzált, királis heterociklusos alapvázak előállítására, és a kvantumkémiai számításokkal tanulmányozzuk a reakciók sztereoselektivitását és mechanizmusát. Az előállított bioaktív vegyületek konnektivitását és relatív konfigurációját spektroszkópiai módszerekkel (IR, NMR, MS, UV-látható), az abszolút konfigurációját valamint oldat és szilárd fázisú konformációját kiroptikai paramétereik (ECD, HPLC-ECD, VCD, OR) mérése és kvantumkémiai számítása, és egykristály röntgendiffrakció révén vizsgáljuk. A sztereokémiai szerkezetvizsgálati kapacitásunkat felhasználjuk bioaktív izolált vegyületek sztereokémiájának meghatározására a mért és számított kiroptikai adatok összehasonlítása révén. Ennek során a vegyületcsaládokra általánosan felhasználható összefüggéseket tárunk fel a sztereokémia és kiroptikai paraméterek között, és folyamatosan fejlesztjük a módszer alkalmazási lehetőségeit (szilárd fázisú és online HPLC-ECD mérések).