

Heterociklusok és Sztereokémia Kutatócsoport

Dr. Antus Sándor, akadémikus, egyetemi tanár

Dr. Kurtán Tibor, egyetemi docens

Dr. Gulácsi Katalin, egyetemi adjunktus

Dr. Mándi Attila, tudományos munkatárs

Tóth László, tudományos segédmunkatárs

Szappanos Ádám, PhD hallgató

Szalóki Dóra, PhD hallgató

Király Sándor PhD hallgató

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 királis, benzol kondenzált *O*-, *N*- és *O,N*-heterociklusok sztereoselektív szintézisével és az előállított származékok sztereokémiai és farmakológiai vizsgálatával (citotoxicitás, idegsejtvédő hatás, PTP1B gátló hatás, antioxidáns és antifungális hatás) foglalkozunk. Célunk új kondenzált heterociklusos alapvázak előállítása és a hozzá kapcsolódó bioaktivitás azonosítása. Vizsgálni kívánjuk a hatás-szerkezet összefüggéseket az alapváz szubsztitúciós mintázata és sztereokémiája vonatkozásában.

Az előállított bioaktív vegyületek konnektivitását és relatív konfigurációját spektroszkópai 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).