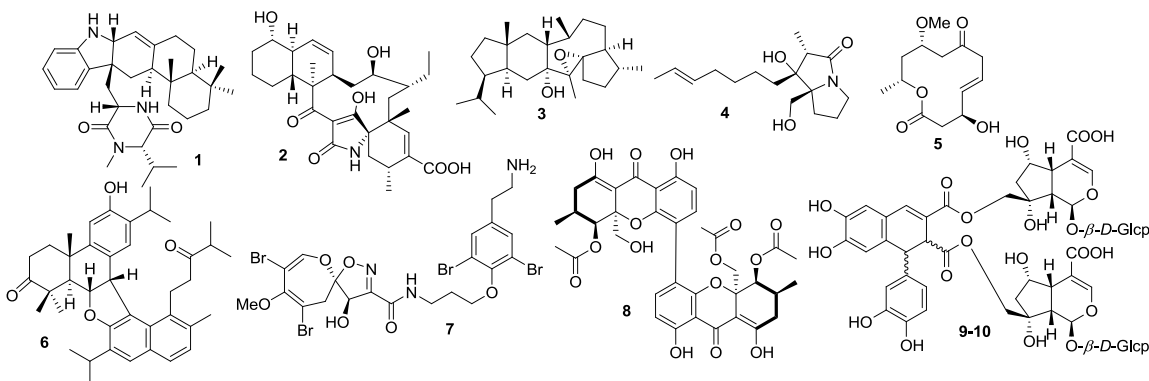


# Változó flexibilitású heterociklusok kiroptikai és *in silico* módszerekkel történő vizsgálata

Mándi Attila

Debreceni Egyetem, Szerves Kémiai Tanszék, 4032 Debrecen

Az abszolút konfiguráció meghatározása, mely a szerkezet-meghatározás utolsó lépése, különösen fontos farmakológiailag aktív vegyületek esetén, ugyanis számos példa ismert az irodalomban arra, hogy egy királis molekula két enantiomere eltérő biológiai hatást mutat. Optikailag aktív vegyületek esetén megoldást jelenthet a síkban polarizált fény és anyag kölcsönhatásán alapuló kiroptikai (pl. ECD, VCD, OR(D)) módszerek alkalmazása. A meghatározás egyik módja a kiroptikai paraméterek mérése és számítása, azonban a méret és a flexibilitás növekedésével a konformáció-analízis során nyert konformer eloszlás és a számított kiroptikai paraméterek funkcionál/bázis vagy oldószerfüggést mutathatnak. Ezért sok esetben a biztonságos meghatározáshoz több elméleti szint és/vagy kiroptikai módszer kombinációja, vagy pedig a flexibilitás csökkentése szükséges. Az esetek egy részében a relatív konfiguráció (RC) revíziója is felmerülhet, melyhez a fent említett kiroptikai paramétereken túl az NMR eltolódások mért és számított értékeit is felhasználjuk.



1. L. H. Meng, C. Y. Wang, A. Mándi, X. M. Li, X. Y. Hu, M. U. Kassack, T. Kurtán, B. G. Wang, *Org. Lett.* **2016**, *18*, 5304.
2. Z. Tian, P. Sun, Y. Yan, Z. Wu, Q. Zheng, S. Zhou, H. Zhang, F. Yu, X. Jia, D. Chen, A. Mándi, T. Kurtán, W. Liu, *Nature Chem. Biol.* **2015**, *11*, 259.
3. Y. Ye, A. Minami, A. Mándi, C. Liu, T. Taniguchi, T. Kuzuyama, K. Monde, K. Gomi, H. Oikawa, *J. Am. Chem. Soc.* **2015**, *137*, 11846.
4. Z. F. Zhou, T. Kurtán, A. Mándi, M. Y. Geng, B. P. Ye, Y. W. Guo, *Org. Lett.* **2014**, *16*, 1390.
5. P. Sun, D. X. Xu, A. Mándi, T. Kurtán, T. J. Li, B. Schulz, W. Zhang, *J. Org. Chem.*, **2013**, *78*, 7030.
6. X. F. Hou, S. Yao, A. Mándi, T. Kurtán, C. P. Tang, C. Q. Ke, X. Q. Li, Y. Ye, *Org. Lett.*, **2012**, *14*, 460.
7. A. Mándi, I. W. Mudianta, T. Kurtán, M. J. Garson, *J. Nat. Prod.*, **2015**, *78*, 2051.
8. D. Rönsberg, A. Debbab, A. Mándi, V. Vasylyeva, P. Böhrler, B. Stork, L. Engelke, A. Hamacher, R. Sawadogo, M. Diederich, V. Wray, W. H. Lin, M. Kassack, C. Janiak, S. Scheu, S. Wesselborg, T. Kurtán, A. H. Aly, P. Proksch, *J. Org. Chem.*, **2013**, *78*, 12409.
- 9-10. Y. M. Ren, C. Q. Ke, A. Mándi, T. Kurtán, C. Tang, S. Yao, Y. Ye, *Tetrahedron* **2017**, *73*, 3213.