

Investigation on Structure-Bioactivity Relationship and Determination of the Absolute Configuration of Natural Products

Im Rahmen meiner Dissertation wurde die Synthese biologisch aktiver Verbindungen für ein besseres Verständnis der Grundlagen des Struktur-Bioaktivität Zusammenhangs durchgeführt.

Kapitel 2 beschreibt die Synthese von Benzamidriboside Derivaten, die eine antitumor Wirkung aufweisen. Die biologischen Testungen der Derivate haben gezeigt, dass die Amid-Funktion des aromatischen Rings die C-2 und die C-3 Hydroxy-Gruppen für die erwünschte Aktivität notwendig sind.

Im Kapitel 3 wird die Synthese des Benzamidribosid-Adenin-Dinukleotid (BAD) behandelt, das zur Erforschung der Enzym-Substrat Verbindung dient. Die röntgenkristallographische Untersuchung dieses Komplexes (BAD) mit Reduktase kann information über die aktive Seite des Enzyms liefern.

Kapitel 4 umfasst die Struktur-Wirkung Untersuchung des Fungiziden Coniothyriomycin. Durch systematische Veränderung des Substitutionsmusters konnte festgestellt werden, welche Substituenten des Moleküls für die fungizide Aktivität verantwortlich und nötig sind.

Kapitel 5 zeigt, dass die theoretisch berechnete chemische Reaktivität mit den experimentellen Daten über die Sensibilitätskapazität potenzieller Allergene gut übereinstimmt. Die LUMO Koeffizienten der Phenanthrenchinon (PAC) Derivaten wurden semi-empirisch berechnet und mit dem experimentellen Daten (Sensibilitätskapazität) verglichen.

Kapitel 6 befasst sich mit der Ermittlung der absoluten Konfiguration von sechs Naturstoffen, deren CD-Spektren mit Hilfe quantenchemischer Methoden berechnet und mit den experimentellen CD-Kurven verglichen wurden.