

Diplomamunka/szakdolgozati és projektmunka témakörök a 2016/2017. tanév I. félévére VEGYÉSZ MSc, VEGYÉSZMÉRNÖK, KÉMIA TANÁR, KÉMIA BSc és MÁS SZAKOSOK számára

Szerves Kémiai Tanszék

Prof. Dr. Batta Gyula

1. Antifungális hatású diszulfid fehérjék NMR szerkezet - funkció összefüggéseinek vizsgálata (több hallgató is lehet)

A PAF és mutánsai, AFP, PAFB, NFAP és lilizin fehérjék 3D szerkezetmeghatározása 3D NMR-el. Szerkezeti dinamikai vizsgálatok 15N relaxáció és telítés átvitel módszerrel. Fehérje kitekeredés tanulmányozása hő, denaturálószer és egyéb hatásokra.

2. Fehérje-szénhidrát és fehérje- fém ligandum interakciók vizsgálata NMR módszerrel és ITC mikrokalorimetriával.

3. Módosított glikopeptid antibiotikumok szerkezetmeghatározása 2D NMR-el.

Referenciák:

- 1.Ádám Fizil, Zoltán Gáspári, Terézia Barna, Florentine Marx, Gyula Batta (2015): "Invisible" Conformers of an Antifungal Disulfide Protein Revealed by Constrained Cold and Heat Unfolding, CEST-NMR Experiments, and Molecular Dynamics Calculations. Chemistry-A European Journal, 21(13), 5136-5144, doi: 10.1002/chem.201404879
- 2.Ulrike Binder, Mojca Benčina, Ádám Fizil, Gyula Batta, Anil K. Chhillar, Florentine Marx (2015): Protein kinase A signaling and calcium ions are major players in PAF mediated toxicity against Aspergillus niger. Febs Letters, 589(11), 1266-1271, doi: 10.1016/j.febslet.2015.03.037
3. Ilona Bereczki, Attila Mándi, Erzsébet Róth, Anikó Borbás, Ádám Fizil, István Komáromi, Attila Sipos, Tibor Kurtán, Gyula Batta, Eszter Ostorházi, Ferenc Rozgonyi, Evelien Vanderlinden, Lieve Naesens, Ferenc Sztaricskai, Pál Herczegh (2015): A few atoms make the difference: Synthetic, CD, NMR and computational studies on antiviral and antibacterial activities of glycopeptide antibiotic aglycon derivatives. European Journal of Medicinal Chemistry, 94, 73-86, doi: 10.1016/j.ejmech.2015.02.028

Prof. Dr. Szilágyi László

Projektmunka (1 fő Kémia BSc) (Van rá jelentkező: Fodor Vivien)

Szeleno-szénhidrát származékok szintézise és szerkezetvizsgálata

Előzetes kutatások kimutatták, hogy különböző szelenilglikozidok, szelenilgalaktozidok és digalaktozidok különböző mértékben kötődnek lektinekhez.

Szelen tartalmú nem redukáló szénhidrátszármazékok előállításai lehetőségeit vizsgáljuk az irodalomban. A különböző szénhidrátszármazékok szerkezeteit NMR spektroszkópiai módszerekkel tanulmányozzuk.

Dr. Juhász László

Kémia BSc projekt és vegyészmérnök diplomamunka (1+2 fő)

C-1 szubsztituált glikálok cikloaddíciós átalakításainak tanulmányozása.

A C-1 atomon elektronszívó szubsztituenszt (CN, COOCH₃, CONH₂) tartalmazó glikálok esetében a kettős kötés reaktivitását e szubsztituensek jelentősen befolyásolják, megnehezítve az ionos jellegű elektrofil addíciókat, azonban új típusú reaktivitással is számolnunk kell. Az 1-C-szubsztituált glikálok esetében vizsgálni kívánjuk a [4+2] típusú cikloaddíciós reakciókat homo- és heterodiénekkal

Study the C-C bond formation transformations of C-1 substituted glycals.

Reactivity of 1-C-substituted glycals is much less studied at least in part due to the not easy accessibility of such compounds. We have elaborated synthetic methods for 1-C-acceptor-substituted glycals by way of carboxylic acid elimination from anhydro-aldehydic acid derivatives or reductive elimination from halogenated derivatives. The acceptor substituent at C-1 may alter the reactivity of the double bond, and ionic electrophilic addition might not be easy. The goal of this project to study the C-C bond formation reactions (Heck-type reaction, C-H activations) of these type of compounds, possessing electron withdrawing groups (CN, CONH₂, COOCH₃) at the anomeric center.

Dr. Kónya Krisztina

Projekt/Szakdolgozat (kémia, vegyész, vegyészmérnök, BSc)

1. Oxigéntartalmú heterociklusok oximjainak előállítása / 1 fő

A kutatás során kromon, flavon, kromanon, flavanon, kumarin származékok oximjainak előállítása a cél klasszikus preparatív szerves kémiai módszerekkel.

2. 7-Hidroxi-8-jódflavon Sonogashira reakcióinak tanulmányozása / 1 fő

A kutatás célja a 7-hidroxi-8-jódflavon előállítása és keresztkapcsolási reakcióinak tanulmányozása alifás és aromás alkinekkal. A Sonogashira reakcióban az alkalmazott katalizátor, bázis, oldószer és hőmérséklet változtatásával a szén-szénkötés kialakításának hozama befolyásolható. A projekt során a paraméterek módosításának vizsgálatára kerül sor.

3. Flavon mezilátok keresztkapcsolási reakcióinak vizsgálata / 1 fő

A kutatás célja a flavon mezilátok előállítása és keresztkapcsolási reakcióinak tanulmányozása. Elsősorban a Suzuki-reakciókban alkalmazott katalizátor, bázis, oldószer és hőmérséklet változtatásával a szén-szénkötés kialakításának optimalása. A projekt során ezen paraméterek módosításának vizsgálatára kerül sor.

4. Szubsztituált kromon származékok előállítása / 1 fő

A kutatás célja B gyűrűjűkben szubsztituált kromon származékok előállítása klasszikus szerves preparatív módszerekkel.

5. Tiol származékok előállítása haloflavonokból / 1 fő

A kutatás során különböző haloflavonok átalakíthatóságát vizsgáljuk tiolokká palládium katalízissel.

6. Halokinolin-származékok keresztkapcsolási reakcióinak vizsgálata / 2 fő

A kutatás során palládium katalizált Suzuki-, Heck-reakciók megvalósítása a cél halokinolin-származékok keresztkapcsolási reakcióiban.

Szakdolgozat

1. 6,7-Dibrómflavon Sonogashira reakciójának optimalálása.- (Van rá jelentkező: Bubán Réka Zsófia (BSc kémia))

A szakdolgozat során 6,7-dibrómflavon előállítása és Sonogashira reakciójának optimalálása kerül megvalósításra különböző alkin származékokkal palládium és réz katalizált keresztkapcsolási reakciókban.

2. 7-Toziloxiflavon Buchwald-Hartwig reakciójának vizsgálata aminokkal. (Van rá jelentkező: Sebó Pál (BSc vmérnök))

A kutatás során 7-hidroxiflavonból előállított tozilát palládium katalizált keresztkapcsolási reakciói kerülnek tanulmányozásra a feladat különböző rendű aminokkal.

Diplomamunka

1. Oxigéntartalmú heterociklusok jódozása. (Van rá jelentkező: Révész Tamás (MSc kémia))

A kutatás célja acetofenon, flavon, flavanon, kromanon, kromon, kumarin jódszármazékainak előállítása különböző jódozó ágensek felhasználásával.

2. Palládium katalizált keresztkapcsolási reakciók vizsgálata flavonoid-triflát származékokon. (Van rá jelentkező: Fekete Lajos (Levelező MSc vegyész))

A projekt célja a flavon triflátok előállítása és keresztkapcsolási reakcióinak tanulmányozása. Elsősorban a Heck- és Suzuki-reakciókban alkalmazott katalizátor, bázis, oldószer és hőmérséklet változtatásával a szén-szénkötés kialakításának optimalálása.

Dr. Bokor Éva

Kémia BSc-Szakdolgozat

C-(β -D-Glükopiranozil)-heterociklusok előállítása a nátrium-függő glükóz kotranszporter 2 (SGLT2) gátlására

A kettős típusú cukorbetegség kezelésében újonnan alkalmaznak nátrium-függő glükóz kotranszporter 2 (SGLT2) gátlószereket, melyek elősegítik a glükóz vizelettel történő ürítését

a szerkezetből, és ezáltal csökkentik a vércukorszintet. Az SGLT2 inhibitorok többnyire C-glükozilezett benzol származékok, melyek központi aromás gyűrűjéhez metilén hídon keresztül egy újabb aromás vagy heteroaromás csoport kapcsolódik. Az irodalomban viszonylag kevés olyan példa van, ahol az ilyen típusú vegyületek első, aromás egységét heteroaromás gyűrűvel helyettesítették. A szakdolgozat során olyan módosításokat tervezünk, ahol a benzol gyűrűt három heteroatomot tartalmazó 5-tagú heterociklusokra (pl. oxadiazol, triazol) cseréljük.

MSc vegyész-Diplomamunka

C-β-D-Glükopiranozil-triazinok szintézise és átalakításuk vizsgálata aza-Diels-Alder cikloaddíciós reakciókban

A triazinok és tetrazinok egyik fontos reakciója a fordított elektronszükségletű [4+2] cikloaddíció. Az ilyen típusú aza-Diels-Alder reakciókat az egyszerű megvalósításuk és megbízhatóságuk miatt a „Click” reakciók közé sorolják és az elmúlt években intenzíven vizsgálják a bioortogonális reakciók körében.

A diplomamunka keretében tervezzük 3-(β-D-glükopiranozil)-1,2,4-triazinok szintézisét, valamint [4+2] cikloaddíciós reakcióban az átalakítási lehetőségeik vizsgálatát további 6-tagú C-glükozil-heterociklusok előállítására (heterociklus: piridin, pirimidin).

Dr. Kurtán Tibor

Kémia BSc projektmunka (1 fő) vegyészmérnök szakdolgozat (1 fő), vegyész és vegyészmérnök MSc diplomamunka (2 fő)

- 1. Kondenzált O,N-heterociklusok előállítása 3-amino-kromán-4-on származékokból**
- 2. Farmakológiailag aktív O,N-heterociklusok előállítása domino reakciókkal**

Tóthné Dr. Illyés Tünde Zita

Kémia BSc projektmunka (1 fő Kémia BSc, Van rá jelentkező: Gál Eszter) + Szakdolgozat (1 fő vegyészmérnök)

Nem redukáló kén tartalmú szénhidrátszármazékok szintézise és szerkezetvizsgálata.

Potenciális tripanoszóma-ellenes vegyületek szintézise során kutatócsoportunkban sikerült aktív, diszulfid hidat tartalmazó szénhidrátszármazékot előállítani. Aromás benzol gyűrűhöz kén atomon keresztül kapcsolt szénhidrátszármazék aktivitást mutatott az álomkór *Trypanosoma brucei* kórokozója ellen.¹

Szintézis stratégiákat keresünk az irodalomban, nem redukáló kén tartalmú diszacharidok előállítására. Az új szerkezetű szénhidrátszármazékokat tripanoszóma-ellenes hatás vizsgálata céljából partner laboratóriumba küldjük.

Dr. Mándi Attila

Projektmunka (3x1 fő kémia BSc)

1. Egy kisméretű szintetikus származék konformációs analízise és ECD spektrumának számítása

A konformációs analízis és az ECD spektrumok alapjainak elsajátítása. Egy kisméretű, a tanszéken szintetizált, kis flexibilitású szerves származék konformációs vizsgálata molekulamechanikai és kvantumkémiai szinten, ill. ECD spektrumának számítása TD-DFT módszerrel az abszolút konfiguráció meghatározása céljából.

2. ECD paraméterek TD-DFT számítása (irodalmazás)

Az ECD szempontjából megfelelő konformációs analízis és CD számítási protokoll ismertetése néhány összefoglaló cikkben és konkrét tanulmányon keresztül.

3. NMR paraméterek kvantumkémiai számítása (irodalmazás)

Az NMR szempontjából megfelelő konformációs analízis és NMR számítási protokoll ismertetése néhány összefoglaló cikkben és konkrét tanulmányon keresztül.

Szakedolgozat (2 fő kémia és vegyészmérnök BSc)

Szerves származékok konformációs analízise és ECD spektrumainak számítása

A tanszéken szintetizált, változó flexibilitású szerves származékok konformációs vizsgálata molekulamechanikai és kvantumkémiai szinten, ECD spektrumaiknak számítása TD-DFT módszerrel, ill. oldat és/vagy szilárd fázisú ECD spektrumok felvétele az abszolút konfiguráció meghatározása céljából.

Dr. Mándi Attila – Dr. Kurtán Tibor

Diplomamunka (2 fő vegyész MSc)

Természetes és szintetikus származékok kromatográfiai elválasztása, optikai paramétereinek mérése és TD-DFT számítása

Optikailag aktív természetes és szintetikus vegyületek HPLC-CD vizsgálata és abszolút konfigurációjuk meghatározása TD-DFT (ECD) számítások segítségével. A konformációs eloszlás tanulmányozása mért szilárd és folyadék CD-k összehasonlításával és számításával.

Dr. Mándi Attila – Dr. Komáromi István

Diplomamunka (1 fő vegyész MSc)

Szerves kémiai reakciómechanizmusok kvantumkémiai számítása

A szerves kémiai reakciók általában jól jellemezhetők néhány geometriai paraméter (pl. a felbomló és kialakuló kötések) függvényében felvett potenciális energiafelülettel. Egy ilyen

felületen a lokális minimumok a „köztitermékeknek”, a minimumokat összekötő nyeregponatok pedig az elemi lépések átmeneti állapotainak felelnek meg. Az adott szerves kémiai reakció mechanizmusát a potenciálfelületen a kiindulási anyagokat és a termékeket összekötő legkisebb aktiválási energiaigényű elemi lépések összességéként határozzuk meg kvantumkémiai (HF, DFT, post-HF) és vegyes kvantumkémiai/molekulamechanikai módszerekkel.

Dr. Kun Sándor

1 fő kémia BSc vagy 1 fő vegyészmérnök BSc

5- β -D-Glikopiranozil-2-aril-2H-tetrazolok előállításai és továbbalakítási lehetőségeinek vizsgálata A 2,5-diszubsztituált tetrazolok biológiai és kémiai szempontból is érdekes, értékes vegyületek, ennek ellenére a szénhidrátok körében kevés képviselőjük ismert.

A kutatás célja a címben jelölt vegyületek előállítása különböző utakon, továbbá tervezzük a kapott származékokból fotokémiai illetve termikus úton generált nitrilimineket cikloaddíciós reakcióinak vizsgálatát.

Dr. Csávás Magdolna

Fotokatalitikus tiol-addíciók vizsgálata 2-N-acetoxi-glikálon (**Van rá jelentkező:** Együd Tamás (vegyészmérnök BSc))

Prof. Dr. Borbás Anikó

Szénhidrát-alapú oxatiazin-koronaéterek szintézise fotokatalitikus tiol-addícióval (**Van rá jelentkező:** Szatmári Enikő (vegyészmérnök BSc))

Dr. Mező Erika

Heparinoid szénhidrát-szulfonsavak szintézise (**Van rá jelentkező:** Barta Judit (vegyészmérnök BSc))

Prof. Dr. Borbás Anikó

Szabad gyökös tiol-addíciók vizsgálata telítetlen szénhidrátokon (**Van rá jelentkező:** Mihálka Dávid (vegyész MSc))