

Szerves Kémiai Tanszék

meghirdetett témái a

2018/2019. tanév I. félévére

Dr. Juhászné Dr. Tóth Éva

(BSc projekt, szakdolgozat vagy MSc diplomamunka)

Exo-glikálok előállítása és elektrofil aminálási reakcióinak tanulmányozása

A glikálok, széles körben használható szerves szubsztrátok, intermedierek, melyeket számos szénhidrát származék és természetes vegyület szintézisében alkalmaznak. A glikálok jellemző reakciói az elektrofileknek az elektronban gazdag kettős kötésre történő ionos, valamint gyökös addíciós reakciói. A szakdolgozat célja különböző exo-glikálok előállítása, ezen vegyületek elektrofil aminálási reakcióinak a tanulmányozása, a reakciókörülmények optimalizálása, illetve az aminálási reakcióban kapott származékok öttagú C-glikozil-heterociklusokká történő átalakítási reakcióinak tanulmányozása.

(BSc projekt, szakdolgozat vagy MSc diplomamunka)

Várhatóan biológiailag aktív C-glikopiranozil heterociklusok prekursorainak előállítása

A C-glikopiranozil heterociklusok olyan cukorszármazékok, amelyekben a hidrolitikusan instabil O-glikozidokban lévő glikozidos oxigént C-atommal helyettesítik. Az ilyen típusú vegyületek a glikomimetikumok egyik ígéretes csoportját alkotják.

A kutatómunka célja olyan szénhidrátszármazékok szintézise, melyek a fenti vegyületcsalád kiindulási anyagai.

Vágvölgyiné Dr. Tóth Marietta

(BSc projekt, szakdolgozat vagy MSc diplomamunka)

Anhidro-aldóz tozilhidrazonok szintézise és kapcsolási reakcióinak vizsgálata

A kutatómunka célja az anhidro-aldóz tozilhidrazinok kapcsolási reakcióinak vizsgálata, mely a szénhidrátkémia egy kevésbé vizsgált területe. Ehhez első lépésben szintetizáljuk a kiindulási cukorszármazékokat, majd vizsgáljuk azok fémmentes vagy átmenetifém-katalizált kapcsolási reakcióit (pl. aril- és alkil-boronsavakkal, terminális alkinekkal, N-heterociklusokkal, aminokkal stb.). A kifejlesztett módszerek egyszerűbb szintézisutakat jelenthetnek biológiailag fontos szénhidrátszármazékok előállítására, és lehetőséget teremthetnek számos napjainkban elterjedt betegség, mint például a 2-es típusú cukorbetegség, szív- és érrendszeri betegségek és az Alzheimer-kór új terápiás lehetőségeinek kifejlesztésére.

Dr. Lázár László

(Diplomamunka, 1 fő vegyész vagy vegyészmérnök MSc)

S-Kötésű ciklodextrin mimetikumok előállítása

A ciklodextrinek hat, hét vagy nyolc α -D-glükopiranoz-egységből álló 1-4-kötésű, ciklikus, nem redukáló oligoszacharidok. A ciklodextrinek asszociációs típusú zárványkomplexeket tudnak képezni a legkülönbözőbb ionokkal, gyökökkel vagy molekulákkal. Ezen tulajdonságuknak köszönhetően, széles körben alkalmaznak ciklodextrineket (elsősorban a β -ciklodextrint) a kozmetikai iparban, az élelmiszer- és a gyógyszeriparban. Kémiai, környezetvédelmi, biotechnológiai, analitikai kémiai és diagnosztikai preparátumokba történő alkalmazásuk is ismert. Célunk az α -, β -, és γ -ciklodextrinek tiomimetikumainak előállítása.

(Diplomamunka, 1 fő vegyész vagy vegyészmérnök MSc)

1-C-Szubsztituált 2-acetoxi-glikálok tiol-én addíciós reakcióinak vizsgálata (1 hallgató)

A tioglikozidok, amelyekben az *O*-glikozidos kötés helyett egy *S*-glikozidos kötés van, értékes glikozid mimetikumok a fokozott kémiai stabilitásuk és a glikozidázokkal szembeni rezisztenciájuk miatt. A tioglikozidos kötés kialakítására számos módszer ismert, ennek ellenére néhány esetben (pl. α -tioglikozidok, α -tiogalaktozidok és β -mannozidok) a kívánt tioglikozid jó hozammal és sztereoszelektivitással történő előállítása problémákba ütközik. Az utóbbi évtizedben tiolok terminális alkénekre történő gyökös addíciós reakcióit is sikeresen alkalmazták tioglikozidos kötés kialakítására. Ezt a gyökös mechanizmusú tiol-alkén addíciót kiterjesztettük addig nem vizsgált, *endo*- és *exo*-glikál, valamint 3-exometilén származékokra. E területen végzett kutatásaink során számos teljesen regio- és sztereoszelektív gyökös tiol-én kapcsolási reakcióra bukkantunk. Ezek a reakciók lehetővé teszik, többek között, 1,2-*cis* α -*S*-kötésű-tiodiszacharidok, α -*S*-kötésű-glikokonjugátumok, 3-dezoxi-*S*-diszacharidok és 1-C-szubsztituált β -*manno* típusú tiodiszacharidok szelektív előállítását, ami más módon nagyon körülményes lenne. A munkánk folytatásaként célunk 1-C-szubsztituált (1-CONH₂, 1-COOMe, 1-CN) 2-acetoxi-glikálok előállítása és reaktivitásuk vizsgálata tioladdíciós reakciókban. A vizsgálatok további célja az előállított glikálokkal végzett tiol-én addíciós reakciók szelektivitásának feltérképezése ahhoz, hogy kiválaszthassuk a legígéretesebb kiindulási vegyületet újszerű, komplex szénhidrát szerkezetek szintéziséhez.

Dr. Kun Sándor

(BSc projekt, szakdolgozat, 2 fő kémia vagy vegyészmérnök hallgató)

Bisz-C,C-glikopiranozil vegyületek előállítása és spirociklizációja

A szénhidrátkémiai kutatások eredményeképp mára több gyógyszer hatóanyaga valamilyen szénhidrát származék. Ilyen készítmények lehetnek többek között véralvadás gátló, antidiabetikus vagy vírusellenes hatásúak. A kutatás során olyan szénhidrát-spirociklusok szintézisét tervezzük, melyektől glikoenzim gátló hatást remélünk.

Ulozonsav illetve ulozil-bromid(onsav) származékok reakcióit fogjuk vizsgálni különféle C-nukleofilekkel, majd az aglikon átalakításait követően megkíséreljük a spirociklizációt. Az új spirociklusok glikogén foszforiláz illetve glikozidáz gátló hatását tervezzük vizsgálni.

Dr. Bokor Éva

(BSc projekt, szakdolgozat vagy MSc diplomamunka, 1 fő)

2-(β-D-Glükopiranozil)-1,3,5-triazinok előállításának vizsgálata

A karboxamidinek fontos karbonsav származékoknak tekinthetők, melyekből számos 5-, illetve 6-tagú nitrogén tartalmú heterociklus készíthető. Korábban a laboratóriumunkban sikeresen valósítottuk meg C-(β-D-glükopiranozil)-formamidinek előállítását, illetve ezekből C-glikozil-azolok (pl. imidazol, 1,2,4-triazol származékok) szintézisét. Jelenleg vizsgáljuk a fent említett amidinek alkalmazási lehetőségét hattagú C-glikozil-heterociklusok előállítására is. A szakdolgozat keretében ezeknek a szénhidrát prekursoroknak a felhasználásával 2-glikozil-1,3,5-triazinok szintézisét fogjuk tanulmányozni.

(BSc projekt, szakdolgozat vagy MSc diplomamunka, 1 fő)

5-(β-D-Glükopiranozil)-1,2,4-triazinok szintézise és aza-Diels-Alder cikloaddíciós reakcióik tanulmányozása

Az 1,2,4-triazinok fontos azadién komponenseknek tekinthetők fordított elektronszükségletű [4+2] cikloaddíciós reakciókban. Az ilyen Diels-Alder típusú gyűrűtranszformációs reakciókat a potenciális bioortogonális reakciók között tartják számon, melyek pl. biomolekulák jelölésében nyerhetnek felhasználást. A diplomamunka keretében eddig ismeretlen 5-(β-D-glükopiranozil)-1,2,4-triazinok szintézisét, valamint C-glikozil-piridin származékokat eredményező cikloaddíciós reakcióik tanulmányozását tervezzük.

(BSc projekt, szakdolgozat vagy MSc diplomamunka, 1 fő)

C-(β-D-Glükopiranozil)-1,2,4,5-tetrazinok szintézise és aza-Diels-Alder cikloaddíciós reakcióik tanulmányozása

Az 1,2,4,5-tetrazinokat széles körben alkalmazzák azadiénként Diels-Alder típusú cikloaddíciós reakciókban. Az ilyen típusú átalakításokat a „click” reakciók között tartják számon, és intenzíven vizsgálják az alkalmazhatóságukat biomolekulák jelölésében. C-Glikozil-1,2,4,5-tetrazinok még nem ismertek az irodalomban, ezért a diplomamunka keretében ilyen heterociklusos monoszacharid származékok szintézisét, valamint a fordított elektronszükségletű Diels-Alder reakcióik tanulmányozását tervezzük.

Tóthné Dr. Illyés Tünde Zita, Prof. Szilágyi László

(Projektmunka+ Szakdolgozat Kémia BSc, 2 fő)

Kén tartalmú szénhidrátszármazékok szintézise és szerkezetvizsgálata

A szacharin a négy leggyakrabban használt energiamentes, szintetikus előállított édesítőszer egyike. Az N-jód-szacharinról megállapították, hogy oligoszacharid szintézisekben feniltioglikozidok aktiválására alkalmas vegyület. Az N-bróm-szacharin nagy mennyiségben és kiváló minőségben állítható elő, elektrofil brómozó reagensként használják szerves szintézisekben. A szakdolgozat keretében glikopiranozil szulfénamid (N-szacharinoil) típusú vegyületek előállítását tűzzük ki célul. Vizsgáljuk a vegyület reakcióit tiolokkal, aminokkal, szelén tartalmú szénhidrátszármazékokkal, valamint az új vegyületek szerkezetét NMR spektroszkópiai módszerekkel.

Dr. Mándi Attila

(Projektmunka, 1 fő)

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.

(Projektmunka, 1 fő)

ECD paraméterek TD-DFT számítása (irodalmazás)

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

(Projektmunka, 1 fő)

NMR paraméterek kvantumkémiai számítása (irodalmazás)

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

(Projektmunka, 1 fő)

VCD paraméterek DFT számítása (irodalmazás)

Az VCD szempontjából megfelelő konformációs analízis és VCD számítási protokoll ismertetése néhány összefoglaló cikken és konkrét tanulmányon keresztül.

(Szakdolgozat, 2 fő kémia BSc vagy vegyészmérnök BSc / Diplomamunka, 1 fő vegyész MSc vagy vegyészmérnök MSc)

Szerves származékok konformációs analízise és ECD spektrumainak számítása

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

(Szakdolgozat, 1 fő kémia BSc vagy vegyészmérnök BSc)

Szerves származékok relatív konfigurációjának meghatározása NMR számításokkal

A tanszéken szintetizált, változó flexibilitású szerves származékok konformációs vizsgálata molekulamechanikai és kvantumkémiai szinten, illetve relatív konfigurációjuk meghatározása C- és H-NMR eltolódási értékek számítása és kísérleti értékekkel való összevetés révén.

Dr. Mándi Attila, Dr. Kurtán Tibor

(Szakdolgozat 1 fő kémia BSc vagy vegyészmérnök BSc)

Szintetikus származékok VCD mérése és DFT számítása

Optikailag aktív szintetikus vegyületek VCD vizsgálata és abszolút konfigurációjuk meghatározása DFT VCD számítások segítségével. A konformációs eloszlás tanulmányozása a mért és számolt spektrumok összehasonlításával.

(Szakdolgozat / Diplomamunka, 2 fő kémia BSc vagy vegyészmérnök BSc, 1 fő vegyész MSc vagy vegyészmérnök MSc)

Természetes és szintetikus származékok kiroptikai paramétereinek mérése és számítása

Optikailag aktív természetes és szintetikus vegyületek abszolút konfigurációjuk meghatározása TD-DFT (ECD, OR) és DFT (VCD) számítások segítségével. A konformációs eloszlás tanulmányozása mért szilárd és folyadék kiroptikai paraméterek összehasonlításával és számításával.

Természetes és szintetikus származékok kromatográfiás elválasztása, ECD 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 vagy vegyészmérnök 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.

Prof. Kurtán Tibor

(BSc szakdolgozat vagy MSc diplomamunka, 3fő)

Idegsejtvédő és PTP1B gátló hatású optikailag aktív izokrománok szintézise és oxidatív biaril kapcsolásuk axiális kiralitású biaril származékokká.

téma során sztereoszelektív szintézissel 1,3-diszubsztituált izokrománok szintézisét végezzük, melyek sztereokémiáját röntgendiffrakcióval, elektronikus és vibrációs cirkuláris dikroizmussal vizsgáljuk a sztereokémia-farmakológiai hatás összefüggések feltárására. A sztereoszelektív heterociklusok szintézise mellett a projekt lehetőséget nyújt a szerkezetvizsgálati (NMR, IR, ECD, VCD, röntgendiffrakció) és analitikai (királis HPLC, HPLC-ECD).

(BSc szakdolgozat vagy MSc diplomamunka, 2fő)

Királis flavanonok szintézise enantioszelektív organokatalitikus reakciókban és biaril kapcsolási reakcióik axiális kiralitású biflavonoid származékok előállítására.

Axiális és centrális kiralitáselemeket tartalmazó bioaktív biflavonoid származékok előállítása során az aszimmetriás szintézisek eszköztára mellett a hallgató megismerheti és elsajátíthatja a sztereokémiai vizsgálatoknál alkalmazott optikai módszereket (ECD, VCD, OR) és a királis HPLC alkalmazását.

(BSc szakdolgozat vagy MSc diplomamunka, 2fő)

Királis szintetikus flavonoidok sztereoizomerjeinek királis HPLC elválasztása és abszolút konfigurációjuk vizsgálata elektronikus és rezgési cirkuláris dikroizmus spektroszkópiával (ECD, VCD).

A projekt lehetőséget nyújt a királis HPLC technika megismerésére és az elválasztott enantiomerek ECD, VCD mérésének elsajátítására. Az ECD és VCD mérések révén a sztereoizomerek abszolút konfigurációját és konformációját határozzuk meg. (két hallgató)

(BSc szakdolgozat vagy MSc diplomamunka, 1fő)

Domino hetero Diels-Alder cikloaddíciós reakciók alkalmazása kondenzált heterociklusok előállítására.

Sztereoszelektív domino Knoevenagel-hetero Diels-Alder reakciókkal új, kondenzált alapvázat tartalmazó, királis heterociklusokat állítunk elő farmakológiai vizsgálatokra. A reakció sztereoszelektivitását NMR módszerekkel, egykristály röntgendiffrakcióval, ECD és VCD mérésekkel szándékozunk vizsgálni.

Prof. Batta Gyula

(Szakdolgozat vagy diplomamunka, több hallgató)

Új antimikrobiális diszulfid fehérjék szerkezet - hatás összefüggéseinek vizsgálata

a., Az NFAP2, AFP és "buborék" fehérjék (< 60 aa) térszerkezetének meghatározása multidimenziós 700 MHz-es NMR módszerekkel. (Elsősorban a saját laptopon is telepíthető CARA szoftverrel történő teljes NMR jelhozzárendelés a feladat, amit szerkezet számolás követhet a CYANA szoftverrel.)

b., Diszulfid minifehérjék szerkezeti dinamikai vizsgálatai (belső mozgások és sporadikus gerjesztett állapotok) ^{15}N NMR relaxáció és telítés átviteli (NMR-CEST) módszerekkel. (A kísérletek feldolgozása és értékelése Topspin és Dynamics Center szoftverekkel).

c., Diszulfid minifehérjék letekeredése hőmérséklet ill. kémiai ágensek hatására; termodinamikai vizsgálatok differenciális szkennelő automata kapilláris mikrokcaloriméterrel (DSC) és NMR-el. (NMR titrálási kísérletek végzése, és értékelésük, DSC mérések és értékelésük).

Antimikrobiális fehérje - ligandum interakciók vizsgálata

Biológiai target molekulák azonosítása érzékeny gombákból származó lizátumokban, NMR kémiai eltolódás titrálás, telítés-átvitel (NMR-STD) és izotermális titrációs mikrokcalorimetria (ITC) módszerekkel. (Sejtlizátumok készítése előírt protokoll szerint, komplexek kikötése kromatográfiás oszlophoz és elválasztásuk tömegspektrometriai (MS) vizsgálat céljából, a kísérletek kiértékelése.)

Gram-pozitív baktériumok, illetve vírusok ellen hatásos, glikopeptid antibiotikumok szerkezetének, dinamikájának, oligomerizálódásának és sejtfal-analóg peptidekkel képzett komplexeinek vizsgálata NMR módszerekkel. (Klasszikus 2D-NMR kísérletek végzése jelazonosítás céljából, térszerkezet meghatározása NOESY/ és kvantitatív ROESY módszerekkel. ^{13}C -és ^{15}N relaxációs mérések és értékelésük a modell-mentes Lipari-Szabó módszerrel.)

Dr. Kiss Attila

(Szakdolgozat kémia BSc vagy vegyészmérnök BSc, 1fő)

Izokromán vázas heterociklusos vegyületek GCMS tulajdonságainak vizsgálata

(Szakdolgozat kémia BSc vagy vegyészmérnök BSc, 1fő)

Változatosan szubsztituált izokromán vázas vegyületek optikai izomereinek elválasztása HPLC módszerrel

Az izokromán vázas vegyületek fontos farmakológiai és biológiai szereppel rendelkező vegyületek családjába tartoznak. Ezek számos képviselője már ismert élettani hatással bíró molekula. A Tanszéken újonnan előállított ilyen típusú molekulák kromatográfiás és tömegspektrometriás tulajdonságainak feltárása egy fontos lépése a vegyületek karakterizálásának és tulajdonságaik meghatározásának. Abban az esetben, ha kiralitás centrumot is tartalmaznak a molekulák, akkor az optikai izomerek elválasztása fontos feladat, hiszen a leggyorsabb módja a tiszta izomerek elérésének a királis preparatív eljárással tisztított vegyület.

Dr. Kónya Krisztina

(Projekt/szakdolgozat 1 fő kémia BSc vagy vegyészmérnök BSc)

Oxigéntartalmú heterociklusok oximjainak előállítása

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

(Projekt/szakdolgozat 1 fő kémia BSc vagy vegyészmérnök BSc)

7-Hidroxi-8-jódflavon Sonogashira reakcióinak tanulmányozása

A projekt célja a 7-hidroxi-8-jódflavon előállítása és keresztkapcsolási reakcióinak tanulmányozása alifás és aromás alkinekkkel. 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.

(Projekt/szakdolgozat 1 fő kémia BSc vagy vegyészmérnök BSc)

Flavon mezilátok keresztkapcsolási reakcióinak vizsgálata

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

(Projekt/szakdolgozat 1 fő kémia BSc vagy vegyészmérnök BSc)

Szubsztituált kromon / kromanon származékok előállítása

A projekt célja B gyűrűjűkben szubsztituált kromon / kromanon származékok előállítása klasszikus szerves preparatív módszerekkel.

(Projekt/szakdolgozat 2 fő kémia BSc vagy vegyészmérnök BSc)

C-H aktiválás oxigéntartalmú heterociklusokon

A kutatás célja a halogén tartalmú flavon, kromon származékok átalakítása boronsav származékokká. Illetve ezen származékok Suzuki reakcióinak megvalósítása, a körülmények optimalizálásával különböző aromás halogén származékokkal.

(Vegyészmérnök MSc diplomamunka, 1 fő)

Flavonboronsav származékok Suzuki reakciói

A kutatás célja a halogén tartalmú flavon, kromon származékok átalakítása boronsav származékokká. Illetve ezen származékok Suzuki reakcióinak megvalósítása, a körülmények optimalizálásával különböző aromás halogén származékokkal.