

Szerves Kémiai Tanszék meghirdetett témái a 2017/2018. tanév II. félévére

Dr. Juhászné Dr. Tóth Éva

(BSc projekt, szakdolgozat vagy MSc diplomamunka)

Öttagú C-glikozil-heterociklusok exo-glikálokból kiinduló előállításának 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.

Várhatóan biológiailag aktív C-glikopiranozil heterociklusok prekurzorainak 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.

Dr. Lázár László

(Diplomamunka, 2 fő vegyész vagy vegyészmérnök MSc)

S-Kötésű ciklodextrin mimetikumok előállítása (1 hallgató)

A ciklodextrinek hat, hét vagy nyolc α -D-glükopiranozil-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.

I-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 sztereoselektivitással 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-*cisz* 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. Gulácsi Katalin

(BSc szakdolgozat)

Királis O- és O,N-heterociklusok előállítása

Különböző gyűrűzárási módszerekkel benzokondenzált heterociklusok előállítását és szerkezetvizsgálatát tervezzük (röntgen-diffrakció, NMR, ECD, VCD). Továbbá tesztelni kívánjuk az új gyűrűrendszerek farmakológiai hatását is.

Bifenilszármazékok előállítása és kiroptikai vizsgálata

Változatosan szubsztituált bifenilek előállítását tervezzük, amelyeken oldalláncot kívánunk kialakítani és a képződő vegyületeket kiroptikai módszerekkel vizsgáljuk.

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 cikkben 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 cikkben 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 kvantumkémiailag 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 kvantumkémiailag 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 / Diplomamunka, 2 fő kémia BSc vagy vegyészmérnök BSc, 1 fő vegyész MSc vagy vegyészmérnök MSc)

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.

(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.

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)

Prof. Batta Gyula

(Szakdolgozat és diplomamunka, több hallgató)

Gombaellenes (Antifungális = AF) diszulfid fehérjék szerkezet - hatás összefüggéseinek vizsgálata

a., Az **NFAP2** illetve **AFP minifehérjék** (< 60 aa) térszerkezetének meghatározása 3-dimenziós NMR módszerekkel. (Elsősorban a saját laptopon is telepíthető CARA szoftverrel történő teljes NMR jelhozzárendelés a feladat, amit szerkezet számolás követhet a CYANA szoftverrel)

b., **AF minifehérjék** szerkezeti dinamikai vizsgálatai (belső mozgások és sporadikus gerjesztett állapotok) ¹⁵N NMR relaxáció és telítés átviteli (CEST) módszerekkel. (A kísérletek feldolgozása és értékelése topspin és Dynamics Center szoftverekkel).

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

Fehérje - ligandum interakciók vizsgálata: target molekulák azonosítása érzékeny gombákból származó lizátumokban, NMR kémiai eltolódás titrálás és izotermális titrációs mikrokalorimetria (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, kémiaileg módosított glikopeptid antibiotikumok szerkezetének és dinamikájának meghatározása 2D NMR-el. (Klasszikus 2D NMR kísérletek végzése jelazonosítás céljából, térszerkezet meghatározás NOESY/ és kvantitatív ROESY módszerekkel. ¹³C-és ¹⁵N relaxációs mérések és értékelésük a modellmentes Lipari-Szabó módszerrel).

Tóthné Dr. Illyés Tünde Zita

(Projektmunka, 1 fő; Szakdolgozat Vegyészmérnök BSc, 1 fő)

Kén tartalmú szénhidrátszármazékok szintézise és szerkezetvizsgálata

A szakdolgozat keretében *kén* tartalmú glikokonjugátumok szintézisét vizsgáljuk. Tervezzük a reakció méretnövelését. Az új vegyületek szerkezet meghatározását 1D- és 2D-NMR módszerekkel végezzük.

Szelén tartalmú szénhidrátszármazékok szintézise és szerkezetvizsgálata.

A szakdolgozat keretében *szelén* tartalmú glikokonjugátumok szintézisét vizsgáljuk. Tervezzük a reakciók körülményeinek optimalizálását. Az új vegyületek szerkezet meghatározását 1D- és 2D-NMR módszerekkel végezzük.

Vágvölgyiné Dr. Tóth Marietta

(Projekt és Szakdolgozat)

Anhidro-aldóz tozilhidrazonok kapcsolási reakcióinak vizsgálata

A kutatómunka célja az anhidro-aldóz tozilhidrazonok kapcsolási reakcióinak vizsgálata, mely egy új kutatási területet jelent a szénhidrátok körében. A munka során előállítjuk a kísérletekhez szükséges kiindulási cukorszármazékokat, és vizsgáljuk azok fémmentes és/vagy fémkatalizált kapcsolási reakcióikban történő alkalmazhatóságát.

Dr. Kónya Krisztina

(Diplomamunka, 1 fő vegyész MSc hallgató)

Oxigéntartalmú heterociklusok Sonogashira reakcióinak tanulmányozása

Különbözően szubsztituált haloflavonok és kromonok szintézisének megvalósítása. Az előállított vegyületek Sonogashira reakcióinak optimalizálása a reakciókörülmények változtatásával. A kísérletek célja változatosan szubsztituált alkinszármazékok előállítása.