

## **A Szerves Kémiai Tanszék 2016/17. tanév 2. félévére meghirdetett projektmunka, szakdolgozati és diplomamunka témák**

### **Dr. Kurtán Tibor kutatási téma hirdetései**

#### **Projekt témák**

- 1) Benzol kondenzált királis O- és O,N-heterociklusok sztereoszelektív előállításának lehetőségei (irodalmi áttekintés egy adott gyűrűrendszerre vagy reakciótípusra)
- 2) Enantioszelektív hetero Diels-Alder reakciók és alkalmazásuk bioaktív származékok előállítására (irodalmi áttekintés)

#### **Szakdolgozat és diplomamunka témák**

- 1) Optikailag aktív izokromán és tetrahidroizokinolin származékok sztereoszelektív szintézise idegsejtvédő hatás vizsgálatokra, elektronikus és vibrációs cirkuláris dikroizmus vizsgálatok oldatban és szilárd fázisban sztereokémia meghatározására. (2 fő Bsc és MSc)
- 2) Hetero Diels-Alder reakciók bioaktív heterociklusok előállítására, sztereoszelektivitás vizsgálatok királis HPLC, HPLC-ECD, ECD és VCD mérésekkel. (2 fő Bsc és MSc)
- 3) Királis nem-racém flavonoid származékok előállítása, farmakológiai és sztereokémiai vizsgálata. Sztereokémia és farmakológiai aktivitás közötti kapcsolatok feltárása. (2 fő Bsc és MSc)

### **Dr. Mándi Attila**

#### **Projektmunka (1-1 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.

## **Szakdolgozat (2 fő kémia BSc vagy vegyészmérnök BSc)**

### **4) 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**

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

#### **1) 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.

#### **2) 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.

**Dr. Mándi Attila – Dr. Komáromi István**

### **Diplomamunka (1 fő vegyész MSc vagy vegyészmérnök MSc)**

#### **1) 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 összességéeként határozzuk meg kvantumkémiai (HF, DFT, post-HF) és vegyes kvantumkémiai/molekulamechanikai módszerekkel.

**Dr. Gulácsi Katalin: szakdolgozat, diplomamunka**

**1) 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.

**2) Kalkonszármazékok gyűrűzárási reakciói**

Változatosan szubsztituált kalkonok hidroxil-aminnal, fenilhidrazinnal, karbamiddal, tiokarbamiddal, stb. történő gyűrűzárását és farmakológiai tulajdonságait vizsgáljuk.

**Dr. Ilyés Tünde Zita: vegyészmérnök szakdolgozat, kémia BSc projekt, szakdolgozat.**

**1) Kén tartalmú szénhidrátszármazékok szintézise és szerkezetvizsgálata.**

Különböző kén tartalmú hexóz- és pentóz-származékok előállítását tervezzük, a reakciókat optimalizáljuk, NMR spektroszkópiai módszerekkel tanulmányozzuk az új származékok szerkezeit.

**2) Szelén tartalmú szénhidrátszármazékok szintézise és szerkezetvizsgálata.**

Különböző szelén tartalmú hexóz- és pentóz-származékok előállítását tervezzük, NMR spektroszkópiai módszerekkel tanulmányozzuk az új származékok szerkezeit.

**Dr. Batta Gyula**

**1) Gombaellenes diszulfid minifehérjék szerkezet-hatás összefüggéseinek vizsgálata (NMR és ITC/DSC mikrokalorimetriai módszerekkel)**

(több jelentkező is elfogadható)

**2) Módosított glikopeptid antibiotikumok NMR szerkezetvizsgálata**

**3) Merev vázú szerves molekulák térszerkezetének meghatározása ROESY / NOESY NMR módszerekkel**