A Szerves Kémiai Tanszék szakdolgozat és diplomamunka témái a 2026/2027. tanév II. félévére

Dr. Bokor Éva

Kémiai Intézet
Kémiai Glikobiológiai Kutatócsoport
Kémiai épület E-422
e-mail: bokor.eva@science.unideb.hu

BSc szakdolgozat/MSc diplomamunka (2 kémia/vegyész/vegyészmérnök szakos hallgató)

Új glikozil-heterociklusok és félszendvics típusú platinafém komplexeik előállítása

A daganatos betegek kezelésére kemoterápiás szerekként egyebek mellett platina komplexeket (pl. ciszplatin, oxaliplatin) alkalmaznak. Ezek a rákellenes szerek azonban súlyos mellékhatásokat is okozhatnak. Így az utóbbi években vizsgálatok indultak más, kevésbé ártalmas platinafém komplexek keresésére is. Ebben a vonatkozásban a platinafémek (pl. Ru, Os, Rh, Ir) félszendvics típusú komplexei egy ígéretes vegyületosztályt képviselnek. A közelmúltban szintetizáltunk egy sorozat ilyen típusú komplexet, melyek N,N-kétfogú ligandumként heterociklusos monoszacharidokat tartalmaztak. Ezek közül több származék aktívnak bizonyult rákos sejtvonalakon, valamint multirezisztens Gram-pozitív baktériumokkal szemben bakteriosztatikus hatást is mutatott. A szerkezet-hatás vizsgálatok tanulmányozására a szakdolgozat/diplomamunka keretében új glikopiranozil-heterociklusok és félszendvics típusú komplexeik szintézisét fogjuk vizsgálni.

Galaktopiranozil-heterociklusok szintézise galektinek gátlására

A galektinek olyan szénhidrát felismerő fehérjék (lektinek), melyek galaktóz származékokat képesek megkötni. Ezek a fehérjék számos biológiai funkciót látnak el, ezért a gyógyszerkutatás területén is molekuláris célpontokká váltak pl. a rák, illetve gyulladásos és fertőző betegségek kezelése kapcsán. A közelmúltban kimutatták, hogy bizonyos C-β-D-galaktopiranozil-azolok (oxazolok, 1,2,3-triazolok) hatékony gátlószerei a galektin 1 és galektin 3 fehérjéknek. Ezt alapul véve a kutatómunka célja új, potenciálisan galektin gátló C-β-D-galaktopiranozil-heterociklusok előállítása. A szintetikus munka során a galaktózegységhez eddig nem vizsgált öt- vagy hattagú heterociklusokat (azolokat/azinokat) kapcsolunk. Az előállított új heterociklusos galaktóz származékok galektingátló hatását nemzetközi együttműködések keretében vizsgáltatjuk meg.

Dr. József János

Kémiai Intézet
Kémiai Glikobiológiai Kutatócsoport
Kémiai Épület, E-421
e-mail: jozsef.janos@science.unideb.hu

BSc szakdolgozat (1 kémia/vegyész/vegyészmérnök szakos hallgató)

Potenciálisan galektin gátló szénhidrátszármazékok szintézise 1-C-szubsztituált glikálok és tiolok fényiniciált tioladdíciós reakcióival

A galektinek a szénhidrát felismerő fehérjék (lektinek) azon népes csoportját alkotják, melyek specifikusan β-galaktozid egységeket tartalmazó származékokhoz képesek kötődni. Mivel számos fiziológiás és patológiás folyamatban (pl. sejtadhézió, gyulladásos folyamatok, fertőző és daganatos betegségek) részt vesznek, ezért az utóbbi években a terápiás célpontok fókuszába kerültek. Kutatócsoportunkban korábban több tiodiszacharidot is szintetizáltunk endo-glikálok és szénhidrát-tiolok fényiniciált tioladdíciós reakciójával, melyek az elvégzett biológiai vizsgálatok alapján ígéretes galektin gátló vegyületeknek bizonyultak. Figyelembe véve a korábban elvégzett szerkezet-hatás vizsgálatokat, valamint a számításos kémiai eredményeket új típusú, hatékony galektin gátló vegyületek szintézisét tervezzük megvalósítani 1-hetaril-szubsztituált endo-glikálok és alifás-, aromás-, valamint szénhidrát-tiolok tioladdíciós reakciójával.

Dr. Juhász László és Nagy Balázs

Kémiai Intézet
Kémiai Glikobiológiai Kutatócsoport
Kémiai Épület, E-409 és E-421
e-mail: juhasz.laszlo@science.unideb.hu és nagy.balazs@science.unideb.hu

MSc diplomamunka (1 hallgató)

Potenciálisan lektin gátló1,2-tiodiszacharid szénhidrátszármazékok szintézise

Régóta ismert, hogy a szénhidrátszármazékok fontos szerepet játszanak a különböző biológiai folyamatokban, mint például a sejtek fejlődése, a sejtek közötti kommunikáció, a sejt-sejt és sejt-vírus felismerés, sejt adhézió, a gyulladásos válasz és az immunválasz. Ezek a folyamatok a legtöbb esetben fehérjékkel (lektinek, glikoenzimek, transzporterek) való kölcsönhatáson keresztül mennek végbe. A természetes cukorszármazékok rendkívül specifikus kölcsönhatásaik miatt értékes gyógyszerjelöltek lehetnek, azonban hidrofilitásuk, metabolikus instabilitásuk és nagyobb mennyiségben való hozzáférhetőségük hiánya gyakran hátráltatja ezt a féle hasznosíthatóságot. Számos olyan vegyületet állítottak már elő, melyek kémiai szerkezetükben és/vagy biológiai hatásukban hasonlítanak a szénhidrátmolekulákra, melyeket glikomimetikumoknak neveznek. A kutatócsoportunkban az elmúlt évek során számos potenciálisan lektin gátló vegyület szintézisét valósítottuk meg glikál származék tiol-én addíciójával. A jelenlegi munka célja a korábban előállított, eddigi leghatásosabb molekulánk szerkezetének módosítása - a cukorgyűrűn és a C-1 szénatomon található karbamoil csoporton

– annak érdekében hogy növeljük a vegyület aktivitását, valamint a szelektivitását a különböző galektinekkel szemben.

Dr. Kónya Krisztina

Kémiai Intézet
Heterociklusos és Sztereokémiai Kutatócsoport
Kémiai épület E-407
e-mail: konya.krisztina@science.unideb.hu

BSc szakdolgozat és MSc diplomamunka (2 hallgató)

Axiális kiralitású flavanon-flavon, nafto-flav(an)on, izokumarin, benzo[b]furán biaril dimer vegyületek előállítása sztereokémiai és farmakológiai vizsgálatokra

Axiális és centrális kiralitáselemeket tartalmazó bioaktív flavanon-flavon és naftol-flav(an)on 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. A célvegyületek természetes eredetű, bioaktív biaril származékokkal mutatnak rokonságot, melyek farmakológiai és kiroptikai vizsgálatát tervezzük kivitelezni.

Dr. Kun Sándor

Kémiai Intézet
Kémiai Glikobiológiai Kutatócsoport
Kémiai épület E-422
e-mail: kun.sandor@science.unideb.hu

BSc szakdolgozat vagy MSc diplomamunka (2 fő kémia/vegyész vagy vegyészmérnök szakos hallgató)

Galaktopiranozil-heterociklusok előállítása galektinek gátlására

A galektinek olyan szénhidrát felismerő proteinek (lektinek), melyek β-galaktozidokat tartalmazó szerkezeteket kötnek meg. Szerepük számos folyamatban megfigyelhető, ezért terápiás célpontokként tekintenek rájuk. A galektinek gátlásával lehetőség nyílhat például a rák, a gyulladásos, fibrotikus és fertőző betegségek kezelésére. A kutatómunka célja új, potenciálisan galektin gátló C-galaktopiranozil-heterociklusok (tetrazolok, oxadiazolok, 1,2,4-triazolok) szintézise. A tervezett vizsgálatok kiterjednek a lehetséges szintézisutak felderítésére, az előállított vegyületek szerkezetének igazolására (NMR és MS módszerekkel) illetve egy nemzetközi együttműködés keretében az inhibitorok galektinekhez való affinitásának illetve a galektintípusok közötti szelektivitásának a meghatározására.

Dr. Mándi Attila

Kémiai Intézet
Heterociklusos és Sztereokémiai Kutatócsoport
Kémiai épület E-412
e-mail: mandi.attila@science.unideb.hu

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

Szerves származékok sztereokémiai vizsgálata számítási kémiai és kiroptikai módszerekkel

Változó flexibilitású optikailag aktív szintetikus és természetes származékok abszolút konfigurációjának meghatározása TD-DFT (ECD, OR) és DFT (VCD) számítások segítségével. A konformációs eloszlás tanulmányozása mért szilárd és folyadék kiroptikai paraméterek összehasonlításával és számításával. Racém elegy vagy kis enantiomer- / diasztereomer felesleg esetén a vegyületek HPLC-ECD vizsgálata is elképzelhető. Amennyiben a relatív konfiguráció nem, vagy csak részben ismert, 13C- és 1H-NMR eltolódási értékeket is számolunk a szerkezet-meghatározás érdekében. Előfordulnak olyan esetek is, ahol a klasszikus konformációs analízisen alapuló módszerek nem vezetnek eredményre. Ilyenkor explicit oldószeres molekuladinamikai trajektóriákból nyert szerkezetek felhasználásával, ill. az oldószer-molekulákkal alkotott stabil komplexekre történő számítással igyekszünk vizsgálni a vegyületek sztereokémiáját.

Dr. Mándi Attila – Fedics Gergely Miklós

Diplomamunka (1 fő vegyész MSc vagy vegyészmérnök MSc)

CD spektrum – oldószerhatás összefüggések vizsgálata CREST QCG alapú módszerrel

Az oldott anyag – oldószer kölcsönhatások jelentősen befolyásolhatják a szerves molekulák ECD és VCD spektrumait, így a kialakuló komplexek figyelembevételével javítható a számolt és mért spektrumok közötti egyezés a problémás esetek egy részében. A CREST program QCG modulja képes ilyen komplexek előállítására, melyek explicit oldószermodelljük révén pontosabb megoldást biztosíthatnak a klasszikus implicit oldószermodelleknél. A kapott eredményeket összehasonlíthatjuk MD alapú módszerekkel.

Dr. Timári István, Farkas László Bence és Tardi Zsuzsanna

Kémiai Intézet
Szerkezeti Kémiai, Molekuláris Felismerés és Kölcsönhatás Kutatócsoport (https://debnmr.unideb.hu/)
Kémiai épület E-27 és E-19
e-mail: timari.istvan@science.unideb.hu és farkas.laszlo.bence@science.unideb.hu és tardi.zs@mailbox.unideb.hu

Szénhidrát-fehérje (lektin) kölcsönhatás vizsgálata NMR spektroszkópiával

A biokémiai folyamatokban nagy jelentősége van a fehérjéknek kismolekulákkal való kölcsönhatásának (pl. jelátvitel, molekuláris felismerés). NMR spektroszkópiás módszerek segítségével vizsgálható, hogy a ligandum, illetve a fehérje mely csoportjai/atomjai vesznek részt a kötődésben, milyen a kötött állapotú ligandum/komplex térszerkezete, valamint jellemezhetjük a kölcsönhatás erősségét és specifikus/nem-specifikus jellegét. A szénhidrát-fehérje komplexek szerkezetfelderítésére telítésátvitelen és/vagy relaxáción alapuló NMR technikákat alkalmazunk, illetve azokat szükség szerint továbbfejlesztjük. A fehérjék kötőrégiójának feltérképezésére a 15N-izotóppal jelölt mintát ligandummal titráljuk, és 2D 15N-1H korrelációs térképen követjük a változást. A kapott eredmények alapján szerkezet-hatás összefüggések elemzését végezzük el.

Prof. Kurtán Tibor, tanszékvezető egyetemi tanár
Kémiai Intézet
Heterociklusos Szintézise és Sztereokémiája Kutatócsoport
Kémiai épület E-405
e-mail: kurtan.tibor@science.unideb.hu

BSc szakdolgozat és MSc diplomamunka témák:

1. Optikailag aktív izokromán és tetrahidroizokinolin származékok szintézise és biaril kapcsolásuk axiális kiralitású biaril heterodimer származékokká
A téma keretében sztereoszelektív szintézissel 1,3-diszubsztituált izokromán és tetrahidroizokinolin származékok szintézisét végezzük el, melyekből Suzuki biaril kapcsolási reakciókkal axiális és centrális kiralitáselemeket tartalmazó heterodimer biaril vegyületeket állítunk elő. A célvegyületek antimikrobiális és sejtosztódásgátló hatását tervezzük vizsgálni, és a sztereokémiát röntgendiffrakcióval, elektronikus és vibrációs cirkuláris dikroizmussal határozzuk meg a sztereokémia-farmakológiai hatás összefüggések feltárására. A heterociklusok sztereoszelektív szintézise mellett a projekt lehetőséget nyújt a szerkezetvizsgálati (NMR, IR, ECD, VCD, röntgendiffrakció) és analitikai (királis HPLC, HPLC-ECD) módszerek alkalmazására és elsajátítására. (2 fő)

2) **Axiális kiralitású flavanon-izokromán és naftol-izokromán biaril hibridvegyületek előállítása sztereokémiai és farmakológiai vizsgálatokra**
Axiális és centrális kiralitáselemeket tartalmazó bioaktív flavanon-izokromán és naftol-izokromán 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. A célvegyületek természetes eredetű, bioaktív biaril származékokkal mutatnak rokonságot, melyek farmakológiai és kiroptikai vizsgálatát tervezzük kivitelezni. (4 fő)

3) **Királis, szintetikus heterociklusok 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 bioaktív vegyületek sztereoizomerjeinek abszolút konfigurációját és konformációját határozzuk meg. (2 fő)

4) **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 szándékozzuk vizsgálni. (4 fő)