

A Szerves Kémiai Tanszék szakdolgozat és diplomamunka témái a 2024/2025. tanév II. félévére

Dr. Juhász László, Dr. József János

Kémiai Intézet
Kémiai Glikobiológiai Kutatócsoport
Kémiai épület E 409 iroda és E 421 labor
e-mail: juhasz.laszlo@science.unideb.hu
e-mail: jozsef.janos@science.unideb.hu

1 fő kémia BSc/vegyéssz mérnök BSc/vegyész MSc/vegyéssz mérnök MSc hallgató

Áramlásos reaktor alkalmazása szénhidrát kémiai szintézisekben

Az áramlásos kémiai szintézisek során a kémiai átalakítást mikrochip vagy csőreaktorban hajtják végre, miközben a reagáló partnereket kontrolált körülmények között (hőmérséklet, nyomás, sebesség) áramoltatják a rendszerben. A klasszikus kémiai szintézissel szemben a lépések (reakció, feldolgozás, izolálás, tisztítás) „térben elkülönülve”, de egy időben zajlanak le. Mivel a kis térfogatú (μL) reagáló partnerek rövid ideig tartózkodnak a reakcióterben, így a reakció gyors, és ennek következtében a mellékreakciók visszaszorulnak, tisztább termék nyerhető. Az alkalmazott kis anyagmennyiségű vegyszerek miatt biztonságosabb a szintetikus folyamat. A folyamatos áramlású kémiai reaktorrendszer alkalmas a „klasszikus” (lombikszintézis) szintetikus átalakítások optimalizálására, hatékony kivitelezésére és a szerves kémiai reakciók folyamatos üzemű megvalósítására. A munka célja szénhidrátkémiai eljárások átültetése és vizsgálata áramlásos körülmények között.

1 fő kémia BSc/vegyéssz mérnök BSc/vegyész MSc/vegyéssz mérnök MSc hallgató

Dr. Juhász László, Dr. Juhászné Dr. Tóth Éva

Kémiai Intézet
Kémiai Glikobiológiai Kutatócsoport
Kémiai épület E 409 iroda és E 408 labor
e-mail: juhasz.laszlo@science.unideb.hu
e-mail: toth.eva@science.unideb.hu

1,2-C,C diszubsztituált glikál származékok tiolén addíciós reakcióinak vizsgálata

A glikálok olyan telítetlen szénhidrátszármazékok, amelyekben a C-1 és C-2 szénatomok között kettős kötés található. Az alkénekhez hasonlóan ezen vegyületek esetén is az addíciós reakciók a legjellemzőbb átalakítások, amelyek a reakciókörülményektől függően ionos vagy gyökös mechanizmus szerint játszódhatnak le. A glikálok addíciós reakcióit magas regioszelektivitás jellemzi, ami a megjelenő glikozílium ion vagy gyök kiemelt stabilitásával értelmezhető. Az 1-C szubsztituált glikálok olyan származékok, amelyekben az anomer centrumhoz szénatomon keresztül kapcsolódnak a szubsztituensek. Az általunk tanulmányozni kívánt 1-C szubsztituált glikálok az anomer centrumon $-\text{CN}$, $-\text{COOMe}$, vagy $-\text{CONH}_2$ csoportot tartalmaznak. Ezen vegyületek reaktivitásának vizsgálata során, egyszerű

módszert dolgoztak ki a csoportunkban 2-jód származékok előállítására majd ezen vegyületek Suzuki-Miyaura típusú keresztkapcsolási reakciójával 1,2-C,C diszubsztituált glikál származékokat nyertek. Ezen munka folytatásaként vizsgálni kívánjuk az 1,2-C,C diszubsztituált glikál származékok átalakítását fotoiniciált tiolén addíciós reakció körülményei között, és tanulmányozni kívánjuk a reakció regio- és sztereoselektivitását. Az előállított vegyületek esetén lehetőség van nemzetközi együttműködés keretein belül biológiai vizsgálatok (pl.: lektin inhibíció) elvégzésére is.

Dr. Kónya Krisztina

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

BSc szakdolgozat és MSc diplomamunka témák:

1) Axiális kiralítású flavanon-flavon és naftol-flav(an)on biaril dimer vegyületek előállítása sztereo-kémiai és farmakológiai vizsgálatokra

Axiális és centrális kiralításelemeket tartalmazó bioaktív flavanon-flavon és naftol-flav(an)on származékok előállítása során az aszimmetriás szintézisek eszköztára mellett a hallgató megismerheti és elsajátíthatja a sztereo-kémiai 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. (2 fő)

Dr. Mándi Attila

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

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

Szerves származékok sztereokémiai vizsgálata számítási kémiai és kiroptikai módszerekkel

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, ^{13}C - 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.

Prof. Kurtán Tibor

Kémiai Intézet
Heterociklusos és Sztereokémiai Kutatócsoport
Kémiai épület E-405
e-mail: kurtan.tibor@science.unideb.hu

BSc szakdolgozat és MSc diplomamunka témák:

1.) Optikailag aktív izokromán és tetrahydroizokinolin származékok szintézise és biaril kapcsolásuk axiális kiralitású biaril heterodimer származékokká

A téma keretében sztereoszelektív szintézissel 1,3-diszubsztituált izokromán és tetrahydroizokinolin 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 szándékozunk vizsgálni. (4 fő)

Vágvölgyiné Dr. Tóth Marietta, Dr. Kaszás Tímea
(BSc szakdolgozat, 2 hallgató)

Kémiai Intézet
Kémiai Glikobiológiai Kutatócsoport
Kémiai épület E 409 iroda és E 421 labor
e-mail: toth.marietta@science.unideb.hu
e-mail: kaszas.times@science.unideb.hu

Vágvölgyiné Dr. Tóth Marietta, Szakács Bence
(BSc szakdolgozat, 1 hallgató)

Kémiai Intézet
Kémiai Glikobiológiai Kutatócsoport
Kémiai épület E 409 iroda és E 421 labor
e-mail: toth.marietta@science.unideb.hu
e-mail: szakacs.bence@science.unideb.hu

Új típusú glikomimetikumok szintézise

A szakdolgozat során szénhidrát-szubsztrátokon tervezünk új vegyületeket előállítani és új szintézismódszereket kidolgozni. Ezzel potenciálisan biológiailag aktív vegyületeket nyerhetünk. Kutatócsoportunkban egyszerű módszert dolgoztak ki anhidro-aldóz oximok anhidro-aldonitrilekből történő előállítására. Az oximokból nitril-oxid állítható elő in situ halogénezéssel és eliminációval. Ezek a köztitermékek változatos módon tovább alakíthatók. A kutatások során a nitril-oxidok reakcióit kívánjuk tanulmányozni C-C kettős és hármas kötésekkel tartalmazó vegyületekkel, amely során C-glikozil-heterociklusos származékokat kaphatunk.