

Szerves Kémiai Tanszék témái a 2019/2020. tanév I. félévére

Vágvölgyiné Dr. Tóth Marietta

Kémiai Intézet

Kémiai Glikobiológiai Kutatócsoport

Kémiai épület E-409

e-mail: toth.marietta@science.unideb.hu

BSc projekt, szakdolgozat vagy MSc diplomamunka

1. 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 alkinokkal, *N*-heterociklusokkal, aminokkal, szilánokkal 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.

Vágvölgyiné Dr. Tóth Marietta és Dr. Juhászné Dr. Tóth Éva

2. Anhidro-aldóz benzoilhidrazonok, mint potenciális rákellenes szerek szintézise

Az utóbbi években kiterjedt kutatások folynak a hidrazid-hidrazon ($-\text{CO}-\text{NH}-\text{N}=\text{CH}-$) származékok szintézise terén. Az ilyen típusú molekulák jelentős biológiai hatással bírnak, mint például gyulladásgátló, antibakteriális, maláriaellenes és rákellenes hatásuk is ismert. Az eddig előállított és vizsgált vegyületek aromás vagy alifás származékok voltak.

A kutatómunka célja a fenti származékokkal analóg szénhidrátszármazékok, az anhidro-aldóz benzoilhidrazonok szintézise a megfelelő glikopiranozil-cianidokból kiindulva, valamint a reakciókhoz szükséges savhidrazid reagensek előállítása.

Dr. Bokor Éva
Kémiai Intézet
Kémiai Glikobiológiai Kutatócsoport
Kémiai épület E-423
e-mail: bokor.eva@science.unideb.hu

BSc szakdolgozat (projektmunka), MSc diplomamunka (1-1 hallgató)

1. 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.

2. 2-C-(β -D-Glükózaminil)-pirimidinek szintézisének vizsgálata

A pirimidinek szintézisét, illetve a biológiai hatásukat széles körben tanulmányozzák. Nukleozid-analóg vegyületek keresése során nagy számban szintetizáltak például C-glikofuranozil-pirimidineket is. Ezzel szemben azonban pirimidinek C-glikopiranozilezett származékai alig ismertek. A közelmúltban C-(β -D-glükopiranozil)formamidinből sikeresen valósítottuk meg számos 2-(β -D-glükopiranozil)-pirimidin szintézisét. E munka folytatásaként a szakdolgozat keretében olyan új származékok előállítását tervezzük, melyek cukoregységként D-glükózamint tartalmaznak.

3. C-Glikozil-1,2,4,5-tetrazinok szintézise és fordított elektronszükségletű 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. A szakdolgozat keretében ilyen heterociklusos monoszacharid származékok szintézisét, valamint a fordított elektronszükségletű Diels-Alder reakcióik tanulmányozását tervezzük.

Dr. Kun Sándor
Kémiai Intézet
Kémiai Glikobiológiai Kutatócsoport
Kémiai épület E-423
e-mail: kun.sandor@science.unideb.hu

BSc szakdolgozat vagy MSc diplomamunka

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 átalakításait tervezzük bisz-C,C-glikopiranozil vegyületekké, majd az aglikon átalakításait követően spirociklusok szintézise a cél. Az új spirociklusok különféle glikoenzim gátló hatását tervezzük vizsgálni.

Dr. Juhász László

Kémiai Intézet

Kémiai Glikobiológiai Kutatócsoport

Kémiai épület E-409

e-mail: juhasz.laszlo@science.unideb.hu

vegyésmérnök BSc hallgatók részére

1-C-szubsztituált glikálszármazékok funkcionálizálási reakcióinak tanulmányozása

A glikálok olyan származékok, melyekben a szénhidrátváz C-1 és C-2 atomjai között kettős kötés található. Ezen vegyületek reaktivitását az elektronban gazdag kettős kötésre történő elektrofil ionos, valamint gyökös addíciós reakciók határozzák meg. Reakcióikat magas regioszelektivitás jellemzi, ami a reakciókban keletkező glikozílium ion vagy glikozil gyök intermedier kiemelkedő stabilitásával értelmezhető. 1-C-szubsztituált glikálok esetében az anomer centrumon valamilyen elektronszívó szubsztituens (CN, CONH₂, COOCH₃) található. Ezeknek a vegyületeknek a reakciói még kevésbé ismertek, részben azért mert az előállításuk meglehetősen nehézkes. Kutatócsoportunkban azonban sikerült egy egyszerű módszert kidolgozni a szubsztituált glikálok előállítására, ami megkönnyíti ezen vegyülettípus reakcióinak tanulmányozását. A munka célja ezen vegyületek előállítása galakto és/vagy gliuko konfigurációban, és a kettőskötés funkcionálizálási lehetőségeinek tanulmányozása.

Dr. Juhász László és Dr. Juhászné Dr. Tóth Éva

vegyész MSc hallgatók részére

Glikál és exo-glikál származékok funkcionálizálási reakcióinak tanulmányozása

A glikálok olyan származékok, melyekben a szénhidrátváz C-1 és C-2 atomjai között kettős kötés található. Az exo-glikálok esetén az anomer centrumhoz exociklusos kettős kötés kapcsolódik. Ezen vegyületek fontos kiindulási anyagai számos szerves kémiai szintézisnek, így átalakítási lehetőségeinek a vizsgálata, kiterjesztése fontos területét képezik a kutatásainknak. A munka során vizsgálni szeretnénk ezen vegyületek előállítását különböző

szénhidrát konfigurációban, és tanulmányozni kívánjuk a kettős kötések funkcionálizálási lehetőségeit. A vizsgálandó reakciók a termikusan, illetve fotoiniciált körülmények közötti szulfonamidálási átalakítások, melyek lehetőséget teremtenének aziridin származékok előállítására, melyek kiindulási anyagai lehetnek egyéb heterociklusos szénhidrát származékoknak. Tervezzük továbbá haloglikálok előállítását (1-, és 2-haloglikálok, illetve exometilénen halogén szubsztituenst tartalmazó haloglikálok), és alkalmazásukat Buchwald-Hartwig aminálási reakciókban.

Dr. Juhászné Dr. Tóth Éva

Kémiai Intézet

Kémiai Glikobiológiai Kutatócsoport

Kémiai épület E-423

e-mail: toth.eva@science.unideb.hu

MSc diplomamunka

1. Várhatóan biológiailag aktív C-glikopiranozil heterociklusok és prekursorainak szintézise

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

Kémiai Intézet

Kémiai Glikobiológiai Kutatócsoport

Kémia Épület E-423

e-mail: lazar.laszlo@science.unideb.hu

BSc projekt, szakdolgozat vagy MSc diplomamunka

1. S-Kötésű ciklodextrin mimetikumok előállítása (1 hallgató)

A ciklodextrinek hat, hét vagy nyolc α -D-glükopiranoz-egységből álló 1-4-kötésű, ciklikus, nem redukáló oligoszacharidok. A ciklodextrinek asszociációs típusú zárványkomplexeke 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.

2. 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. Mándi Attila

Kémiai Intézet

Heterociklusos és Sztereokémiai Kutatócsoport

Kémiai épület E-412

e-mail: mandi.attila@science.unideb.hu

Mándi Attila

Projektmunka (1 fő kémia BSc)

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.

Mándi Attila

Projektmunka (1 fő kémia BSc)

ECD paraméterek TD-DFT számítása (irodalmazás)

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

Mándi Attila

Projektmunka (1 fő kémia BSc)
NMR paraméterek kvantumkémiai számítása (irodalmazás)

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

Máondi Attila
Projektmunka (1 fő kémia BSc)
VCD paraméterek DFT számítása (irodalmazás)

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

Máondi Attila
Szakedolgozat (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 spektrumaiknak számítása TD-DFT módszerrel, ill. oldat és/vagy szilárd fázisú ECD spektrumok felvétele az abszolút konfiguráció meghatározása céljából.

Máondi Attila
Szakedolgozat (1 fő kémia BSc vagy vegyészmérnök BSc) / Diplomamunka (1 fő vegyész MSc vagy vegyészmérnök MSc)
Molekuladinamika alapú ECD módszer fejlesztése és tesztelése

Klasszikus konformációs analízisen alapuló módszerekkel nem megfelelően reprodukálható esetekben explicit oldószeres molekuladinamikai trajektóriákból nyert szerkezetek felhasználásával a sztereokémia (abszolút konfiguráció vagy konformáció) meghatározása, ill. a korábbi egyezések javítása.

Máondi Attila
Szakedolgozat (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 eltoldási értékek számítása és kísérleti értékekkel való összevetés révén.

Máondi Attila - Kurtán Tibor
Szakedolgozat (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.

Máondi Attila - Kurtán Tibor

Szakedolgozat / 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.

Mándi Attila - Kurtán Tibor

Szakedolgozat / 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

Kémiai Intézet

Heterociklusos és Sztereo-kémiai Kutatócsoport

Kémiai épület E-326

tel: 22466

e-mail: kurtan.tibor@science.unideb.hu

BSc szakdolgozat vagy MSc diplomamunka

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

A 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). (három fő)

2. 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. (két fő)

3. 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 fő)

4. Domino hetero Diels-Alder cikloaddációs 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. (1 fő)

Synthesis of chiral biaryls with axial and central chirality elements.

Stereoselective biaryl coupling reactions are to be studied to prepare bis-isochroman and other heterocyclic derivatives containing a chiral biaryl axis and central chirality elements for pharmacological studies. The stereochemistry of the target molecules is to be analyzed by chiroptical measurements supported with calculations. (1 student)

Domino Knoevenagel-cyclization reactions for the preparation of condensed heterocycles.

Stereoselective domino Knoevenagel-cyclization reactions are to be performed to prepare chiral condensed heterocycles for pharmacological studies. The stereoselectivity is analyzed by NMR and chiroptical spectroscopic methods and X-ray diffraction. (1 student)

Prof. Batta Gyula

Kémiai Intézet és Biológiai és Ökológiai Intézet, Szerkezeti Biológiai és Molekuláris Felismerési Kutatócsoport, honlap: structbiol.unideb.hu

Kémiai épület fszt. E-18 iroda és B-13 fehérje labor

e-mail: batta@unideb.hu tel: 22234

Szakdolgozat vagy diplomamunka témák

1. Antimikrobiális hatású diszulfid fehérjék szerkezet - hatás összefüggései (több hallgató is lehet)

a., Az **NFAP2**, **AFP** és "**buborék**" **fehérjék (PAFC)** (< 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 követ a CYANA szoftverrel.)

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

c., Diszulfid minifehérjék stressz tűrése: extrém hőmérséklet és kémiai ágensek (DMSO) hatása, vizsgálatok differenciális szkennelő mikrokaloriméterrel (DSC) és NMR-el. (titrálás követése NMR spektrumokkal és értékelésük, DSC mérések és termodinamikai értékelésük).

2. Antimikrobiális fehérje - ligandum interakciók vizsgálata: biológiai target molekulák azonosítása érzékeny gombákból származó lizátumokban, NMR kémiai eltolódás titrálás, telítés-átvitel (NMR-STD) és izotermális titrációs mikrokolorimetria (ITC) módszerekkel. (Sejtlizátumok készítése előírt protokoll szerint, komplexek kikötése kromatográfiás oszlophoz és elválasztásuk tömegspektrometriai (MS) vizsgálat céljából, a kísérletek kiértékelése.)

3. Gram-pozitív baktériumok illetve vírusok ellen határos, 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. ¹³C-és ¹⁵N relaxációs mérések és értékelésük a modell-mentes Lipari-Szabó módszerrel.)

Irodalom:

1. A.Huber, D.Hajdu, D. Bratschun-Khan, Z.Gáspári, M. Varbanov, S. Philippot, Á.Fizil, A. Czajlik, Z. Kele, C. Sonderegger, L.Galgóczy, A.Bodor, F. Marx, **G. Batta**: *New antimicrobial potential and structural properties of PAFB: a cationic, cysteine-rich protein from Penicillium chrysogenum Q176* **SCIENTIFIC REPORTS 8**: Paper 1751. 16 p. (2018) <http://www.nature.com/articles/s41598-018-20002-2>

2. C. Sonderegger, Á. Fizil, L. Burtscher, D. Hajdu, A. Munoz, Z. Gáspári, N.D. Read, **G. Batta**, F. Marx: *D19S Mutation of the Cationic, Cysteine-Rich Protein PAF: Novel Insights into its Structural Dynamics, Thermal Unfolding and Antifungal Function*, **PLOS ONE**, 12(1) e0169920, DOI: 10.1371/journal.pone.0169920 (2017) <http://journals.plos.org/plosone/article?id=10.1371/journal.pone.0169920>

3. Á. Fizil, Z. Gáspári, T. Barna, F. Marx, **G. Batta** (2015): *"Invisible" Conformers of an Antifungal Disulfide Protein Revealed by Constrained Cold and Heat Unfolding, CEST-NMR Experiments, and Molecular Dynamics Calculations*. **Chemistry-A European Journal**, 21(13), 5136-5144, doi: 10.1002/chem.201404879, (2015) <http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/chem.201404879/epdf>

4. I.Bereczki, A.Mándi, E.Róth, A.Borbás, Á.Fizil, I. Komáromi, A.Sipos, T.Kurtán, **G. Batta**, E. Ostorházi, F. Rozgonyi, E. Vanderlinden, L. Naesens, F.Sztaricskai, P.Herczegh (2015): *A few atoms make the difference: Synthetic, CD, NMR and computational studies on antiviral and antibacterial activities of glycopeptide antibiotic aglycon derivatives*. **European Journal of Medicinal Chemistry**, 94, 73-86, 2015. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0223523415001245>

5. S. Boros, Z.Gáspári, G. Batta
Accurate NMR Determinations of Proton-Proton Distances, **Annual Reports on NMR Spectroscopy**, 94, 1-39 (2018)

6. Batta, Gyula ; Bodor, Andrea ; Kövér, Katalin ; Martinek, Tamás ; Perczel, András ; Tőke, Orsolya
NMR- és ESR-spektroszkópia In: Buday, L; Nyitray, L; Perczel, A (szerk.) **Ezerarcú fehérjék**
Budapest, Magyarország : Semmelweis Kiadó és Multimédia Stúdió, (2018) pp. 203-256. , 54 p.

7. Váradi, Györgyi ; Tóth, Gábor ; Batta, Gyula
Structure and Synthesis of Antifungal Disulfide β -Strand Proteins from Filamentous Fungi
Microorganisms 7 : 1 Paper: 5 , 10 p. (2019)

Tóthné Dr. Illyés Tünde Zita

Kémia Intézet

Kémia épület E-20

e-mail: illyestz@unideb.hu

Prof. Szilágyi László

Kémia Intézet
Kémia épület E-7, E-20
e-mail: szilagyilaszlo@science.unideb.hu

Kémia BSc projektmunka + szakdolgozat (kémia BSc)

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 fenil-tioglikozidok 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, aminosokkal, szelén tartalmú szénhidrátszármazékokkal, valamint az új vegyületek szerkezetét NMR spektroszkópiai módszerekkel.

MSc diplomamunka

Bimán vázra épített S és Se tartalmú szénhidrátszármazékok

Az irodalomban kevés bimán alapú szénhidrát származék ismeretes. Ezen heterociklusos vegyületek nagyon jó fotofizikai tulajdonságokkal rendelkeznek. Kutatócsoportunkban mono- és diszacharidokat diszulfid híddal vagy szelénoglikozidos kötésekkel kapcsolunk *syn*- és *anti*- bimánokra. Ezen új származékok fluoreszcens vagy nem fluoreszcens tulajdonságokkal rendelkeznek. Glikozil azidok Cu(I) katalizált cikloaddíciója bimán-dietinil származékokra, *1,2,3-triazol* gyűrűt tartalmazó új vegyületek szintézisét teszi lehetővé. A további szintetikus cél szabad szénhidrát-származékok kapcsolása S és Se atomokon keresztül binánokra, az új vegyületek szerkezetigazolása 1D és 2D NMR módszerekkel.

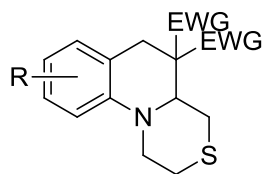
Dr. Kiss Attila és Tóth László

Kémia Intézet
Szelektív Szintézismódszerek Kutatócsoport
Kémia épület E-325
e-mail: kiss.attila@science.unideb.hu

Diplomamunka

1. Több heteroatomot tartalmazó heterociklusok szintézise gyűrűzárási reakciókkal

Témavezető: Dr. Kiss Attila egyetemi docens
Konzulens: Tóth László egyetemi tanársegéd



2. Benzokondenzált heterociklusok szintézise és szerkezetvizsgálata

Témavezető: Dr. Kiss Attila egyetemi docens
Konzulens: Tóth László egyetemi tanársegéd

