

Szerves Kémiai Tanszék szakdolgozat és diplomamunka témái a 2020/2021. tanév I. félévére

Dr. Juhász László, Homolya Ágnes

Kémia Intézet

Kémiai Glikobiológiai Kutatócsoport

Kémiai épület E-409

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

BSc szakdolgozat vagy MSc diplomamunka (2 hallgató)

1-C szubsztituált glikál származékok funkcionálizálási reakcióinak vizsgálata

Különböző mono-, oligo- és poliszacharidok már régóta ismertek, mint tápanyagok, váz- és kötőszövetek alkotóelemei. Ezen kívül azonban fontos szerepet játszanak a sejtfelszíni felismerési és jelátviteli folyamatokban. A biológiai funkcióik mellett széleskörűen alkalmazhatóak a szerves kémiában, mint komplex molekulák szintézisének királis nem racém kiindulási vegyületei.

A glikálok olyan szénhidrátszármazékok, melyekben a C-1 és C-2 szénatomok között kettős kötés található. E vegyületekre a kettős kötésre történő elektrofil ionos, valamint gyökös addíciós reakciók a legjellemzőbbek. Ezen vegyületek egy különleges csoportját jelentik az 1-C szubsztituált glikálok, melyek C-1 szénatomján elektronszívó (CN, COOCH₃, CONH₂) csoportok találhatóak.

Kutatócsoportunkban korábban már részletesen tanulmányozták ezen származékok számos átalakítási lehetőségét, melyeket a jövőben szeretnénk kiterjeszteni, és olyan további funkcionálizálási reakciók tanulmányozását tervezzük megvalósítani, amelyeket 1-C szubsztituált glikálok nem vizsgáltak még korábban, mint például a jódzidálási, az azidofluoralkilizési vagy a trifluorometilalkinizációs reakció. Vizsgálni kívánjuk a C-1 szubsztituens (-CONH₂, -COOMe, -CN), valamint a cukorváz konfigurációjának (glüko, galakto) hatását az átalakítások hozamára, valamint sztereo- és regioszelektivitására.

Dr. Juhász László, Homolya Levente

Kémia Intézet

Kémiai Glikobiológiai Kutatócsoport

Kémiai épület E-409

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

BSc szakdolgozat (1 hallgató)

1-C szubsztituált glikálszármazékok Ferrier átrendeződésének vizsgálata (szakdolgozat)

Különböző mono-, oligo- és poliszacharidok már régóta ismertek, mint tápanyagok, víz- és kötőszövetek alkotóelemei. Ezen kívül azonban fontos szerepet játszanak a sejtfelszíni felismerési és jelátviteli folyamatokban. A biológiai funkcióik mellett széleskörűen alkalmazhatóak a szerves kémiában, mint komplex molekulák szintézisének királis nem racém kiindulási vegyületei.

A glikálok olyan szénhidrátszármazékok, melyekben a C-1 és C-2 szénatomok között kettős kötés található. E vegyületekre a kettős kötésre történő elektrofil ionos, valamint gyökös addíciós reakciók a legjellemzőbbek. Ezen vegyületek egy különleges csoportját jelentik az 1-C szubsztituált glikálok, melyek C-1 szénatomján elektronszívó (CN, COOCH₃, CONH₂) csoportok találhatók.

A glikálokra jellemző, már bő ötven éve ismert Ferrier-átrendeződés során 2,3-telítetlen glikozilszármazékok alakíthatók ki. A reakció során a C3 szubsztituens lehasadásával létrejövő oxokarbéniumion reagál az alkalmazott nukleofillel, így kialakítva a megfelelő terméket. Az első próbálkozások során Lewis-sav jelenlétében írták le a reakciót, azonban azóta több más aktiválószer, mint például Brønsted-savakat, vagy átmenetifém-sókat is sikeresen alkalmaztak a reakciókban. A munka során célunk a vizsgálandó vegyületek előállítása, és a Ferrier átrendeződési reakcióknak a vizsgálata elsősorban C-nukleofilek alkalmazásával, mint például a trimetilszilil-cianid.

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

Kémia Intézet

Kémiai Glikobiológiai Kutatócsoport

Kémiai épület E-409

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

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

BSc szakdolgozat (1 hallgató)

Glikál és exo-glikál származékok funkcionálizálási reakcióinak tanulmányozása

A glikálok olyan származékok, melyekben a szénhidrátvíz 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 haloaminálási 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 szubsztituenset tartalmazó haloglikálok), és alkalmazásukat Buchwald-Hartwig aminálási reakciókban.

Dr. Juhászné Dr. Tóth Éva
Institute of Chemistry
Chemical Glycobiology Research Group
Chemistry Building E-423
e-mail: toth.eva@science.unideb.hu

BSc Thesis (1 student)

Study of functionalization reactions of glycals and exoglycals

Glycals are derivatives having a double bond between the C-1 and C-2 atoms of the carbohydrate backbone. In the case of exoglycals, an exocyclic double bond is attached to the anomeric center. These compounds are important starting materials for many organic syntheses, and the investigation of their conversion potential is an important area of our research. In this work, we would like to investigate the preparation of these compounds in different carbohydrate configurations and to study the functionalization of double bonds. The reactions to be investigated are the haloamination modifications under thermal or photoinitiated conditions, which would provide an opportunity for the preparation of aziridine derivatives which may be starting materials of other heterocyclic carbohydrate.

Vágvölgyiné Dr. Tóth Marietta
Kémiai Intézet
Kémiai Glikobiológiai Kutatócsoport
Kémiai épület E-409
e-mail: toth.marietta@science.unideb.hu

BSc szakdolgozat vagy MSc diplomamunka

Anhidro-aldóz- és aldono-lakton tozilhidrazonok szintézise és kapcsolási reakcióinak vizsgálata

A cukor tozilhidrazonok fémmentes és átmenetifém katalizált kapcsolási reakciói a szénhidrátkémia egy kevésbé vizsgált területét jelentik. A közelmúltban, kutatócsoportunkban szisztematikus kutatómunkába kezdtünk az anhidro-aldóz tozilhidrazonok átmenetifém-katalizált, illetve fémmentes kapcsolási reakciói terén, melynek eredményeként sikeresen alakítottunk ki C-O, C-S és C-C kötéseket. A kifejlesztett módszerek egyszerűbb szintézis utakat 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.

A kutatómunka célja a fentiek alapján:

- a kapcsolási reakciókhoz szükséges anhidro-aldóz tozilhidrazonok szintézise
- a kapcsolási reakciókhoz szükséges aldono-lakton tozilhidrazonok szintézise
- az *N*-heterociklusokkal végzett kapcsolási reakciókhoz szükséges 4-aril-1H-1,2,3-triazolok szintézise
- anhidro-aldóz tozilhidrazonok fémmentes kapcsolási reakcióinak vizsgálata 4-aril-1H-1,2,3-triazolokkal
- anhidro-aldóz tozilhidrazonok Pd-katalizált reakcióinak vizsgálata jód-benzol származékokkal
- anhidro-aldóz tozilhidrazonok terminális alkinekkal végzett kapcsolási reakcióinak tanulmányozása
- aldono-lakton tozilhidrazonok kapcsolási reakcióinak vizsgálata aril-boronsavakkal
- aldono-lakton tozilhidrazonok kapcsolási reakcióinak vizsgálata *N*-heterociklusokkal

Az elvégzendő nagyszámú kísérleti munka természetesen több szakdolgozat, illetve diplomamunka elkészítését teszi lehetővé.

Dr. Bokor Éva

Kémiai Intézet

Kémiai Glikobiológiai Kutatócsoport

Kémiai épület E-423

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

BSc szakdolgozat, MSc diplomamunka (1-1 hallgató)

2-(β -D-Glükopiranozil)-1,3,5-triazinok szintézisének tanulmányozása

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*-glükozil-azolok (pl. imidazol, 1,2,4-triazol származékok) szintézisét. Jelenleg vizsgáljuk a fent említett amidinek alkalmazási lehetőségét hattagú *C*-glükozil-heterociklusok előállítására is. A szakdolgozat keretében ezeknek a szénhidrát prekursoroknak a felhasználásával 2-glükozil-1,3,5-triazinok szintézisét fogjuk tanulmányozni.

5-C-Glikopiranozil-1,2,4-triazinok szintézise és aza-Diels-Alder cikloaddíciós reakcióik tanulmányozása

Az 1,2,4-triazinok azadiénként fordított elektronszükségletű [4+2] cikloaddíciós reakciókban vehetnek részt. Az ilyen Diels-Alder típusú gyűrűtranszformációs reakciókat a potenciális bioortogonális reakciók körében is vizsgálják, melyek pl. biomolekulák jelölésében

nyerhetnek felhasználást. A diplomamunka keretében eddig az irodalomban nem ismert 5-*C*-glikopiranozil-1,2,4-triazinok szintézisét, valamint *C*-glikozil-piridin származékokat eredményező cikloaddíciós reakcióik tanulmányozását tervezzük.

***C*-Glikopiranozil-1,2,4,5-tetrazinok előállítása és aza-Diels-Alder cikloaddíciós reakcióik vizsgálata**

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 vizsgálják az alkalmazhatóságukat biomolekulák jelölésében. *C*-Glikozil-1,2,4,5-tetrazinok még nem ismertek az irodalomban, ezért a szakdolgozat/diplomamunka keretében ilyen heterociklusos monoszacharid származékok szintézisét, valamint a fordított elektronigényű Diels-Alder reakcióik tanulmányozását tervezzük.

***C*-Galaktopiranozil-heterociklusok, mint lehetséges galektin gátló vegyületek előállítása**

A *C*-glikopiranozil heterociklusok egy fontos csoportját alkotják a szénhidrátartalmú kismolekuláknak, melyeknek széles körben vizsgálják a biológiai hatásait. A kutatások során e vegyületosztály számos biológiailag aktív képviselőjét, mit például szénhidrátkötő fehérjék gátlószereit fedezték már fel. A közelmúltban *C*- β -*D*-galaktopiranozil-azolok esetében mutattak ki galektin gátló hatásokat. A szakdolgozat/diplomamunka keretében új *C*- β -*D*-galaktopiranozil-heterociklusok szintézisét fogjuk megvalósítani, melyeknek a galektin gátló hatását tervezzük vizsgálni.

Synthesis of *C*-glycopyranosyl 1,2,4,5-tetrazines and study of their aza-Diels-Alder cycloadditions

1,2,4,5-Tetrazines are widely used as azadienes in Diels-Alder cycloaddition reactions. These types of reactions belong to the so called „click” reactions. The potential application of these transformations is intensively studied, e.g. for labeling of biomolecules. *C*-Glycosyl 1,2,4,5-tetrazines are unknown compounds, therefore the aim of the diploma work will be the synthesis of such type of molecules. In addition, the study of the inverse electron-demand [4+2] cycloaddition reactions of these heterocycles is also planned.

Synthesis of *C*-galactopyranosyl heterocycles as potential inhibitors of galectins

C-Glycopyranosyl heterocycles are among the important group of carbohydrate-based small molecules, whose biological effects are extensively studied. Numerous biologically active representatives of this compound class – e.g. inhibitors of carbohydrate binding proteins – have been discovered. Recently, some *C*- β -*D*-galactopyranosyl azoles were shown to have galectin inhibitory activities. In the course of the diploma work the syntheses of new *C*- β -*D*-galactopyranosyl heterocycles are planned for the inhibition of galectins.

Dr. Lázár László

Kémiai Intézet

Kémiai Glikobiológiai Kutatócsoport

Kémia Épület E-423

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

BSc szakdolgozat vagy MSc diplomamunka

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 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.

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 -tioglükozidok, 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-*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

Tóthné Dr. Illyés Tünde Zita
Kémiai Intézet
Kémia Épület E-20
e-mail: illyestz@unideb.hu

Szakedolgozat (Biomérnök BSc, 3 hallgató)

Kén és szelén tartalmú szénhidrátszármazékok szintézise és szerkezetvizsgálata

A diglikozil-diszulfidok, diszulfido-glikozidok valamint ezen szeleno- analógjai különböző biológiai aktivitással rendelkeznek. Egyes származékok kötődnek a *Con A*-hoz, mások a Chagas-betegség etiológiai ágensének *Trypanosoma cruzi*-val szemben mutatnak gátló hatást (in vitro). Számos galaktóz- és/vagy laktóz glikokonjugátumok gátolják a növényi agglutinin és a különböző humán galektinek tumorsejtekhez való kötődését.

A szakedolgozat keretében új, *kén* és *szelén* tartalmú glikokonjugátumok szintézisét tervezzük valamint az új vegyületek szerkezet meghatározását 1D- és 2D-NMR módszerekkel.

Dr. Mándi Attila

Kémiai Intézet
Heterociklusos és Sztereo-kémiai 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 cikken 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 cikken 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 vegyészmeérnök BSc) / Diplomamunka (1 fő vegyész MSc vagy vegyészmeérnök 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 vegyészmeérnök BSc) / Diplomamunka (1 fő vegyész MSc vagy vegyészmeérnök 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 vegyészmeérnök 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 eltolódási értékek számítása és kísérleti értékekkel való összevetés révén.

Máondi Attila - Kurtán Tibor

Szakedolgozat (1 fő kémia BSc vagy vegyészmeérnök 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 vegyészmeérnök BSc, 1 fő vegyész MSc vagy vegyészmeérnök 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 Sztereokémiai Kutatócsoport

Kémiai épület E-326

tel: 22466

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

BSc szakdolgozat vagy MSc diplomamunka

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)

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)

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)

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. (1 fő)

Axiális kiralitású naftol származékok előállítása naftol származékokból és átalakítások centrális és axiális kiralitáselemeket tartalmazó vegyületekké.

Axiális és centrális kiralitáselemeket tartalmazó biaryl származékok előállítását tervezzük naftol származékokból. Az egyik útvonalon a naftol származékokból halogén származékokat állítunk elő, melyekkel Pd- vagy Cu-katalizált keresztkapcsolási reakciókat hajtunk végre. Vizsgálni kívánjuk az oxidatív biaryl kapcsolási reakciók lehetőségét is. A biaryl kötés kialakítása után az aril egységeken kalcion, majd flavanon szerkezeti egységeket alakítunk ki. Az előállított sztereoizomerek sztereokémiáját kiroptikai módszerekkel kívánjuk vizsgálni.

A másik útvonalon a naftol származékokból centrális kiralitáselemet tartalmazó flavanon származékokat állítunk elő, és ezeket kapcsoljuk axiális kiralitáselemet tartalmazó biaryl származékokká. Az előállított vegyületek bioaktivitását több hatásterületen tervezzük feltérképezni, és sztereokémia-hatás összefüggéseket is tervezünk is vizsgálni.

(2 fő)

BSc or MSc student

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 (több hallgató is lehet)**1. Új antimikrobiális diszulfid fehérjék szerkezet - hatásösszefüggéseinek vizsgálata**

a., A PAFC "buborék" fehérje és a PAFgopt optimalizált fehérje (< 65 aa) térszerkezetének meghatározása multidimenziós (700 MHz-es) NMR módszerekkel. (Elsősorban a sajátlapon is telepíthető CARAszoftverrel történő teljes NMR jelhozzárendelés a feladat, amit szerkezet számolás követhet a CYANAszoftverrel.)

b., Antimikrobiális minifehérjék szerkezeti dinamikai vizsgálatai (belső mozgások és sporadikus gerjesztett állapotok) ¹⁵N, ¹³C NMR relaxációs és telítés átviteli (NMR-CEST) módszerekkel. (A kísérletek feldolgozása és értékelése Topspin és Dynamics Center szoftverekkel).

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