

Szerves Kémiai Tanszék szakdolgozat és diplomamunka témái a 2021/2022. tanév II. félévére

Dr. Juhász László és József János

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

Per-O-alkilezett *exo*-glikálok [2+2] típusú cikloaddíciójának vizsgálata

Kutatócsoportunkban korábban vizsgáltuk per-*O*-acilezett *exo*-glikálok [2+2]-típusú cikloaddíciós reakcióját klórszulfonil-izocianáttal és diklór-keténnel. A klórszulfonil-izocianát addíciókban glikopiranozilidén spiro- β -laktámokat, míg a diklór-ketén-addíciókban a képződő di(mono)klór ciklobutanonok redukív dehalogénezését követően glikopiranozilidén spiro-ciklobutanonokat nyertünk. Utóbbi származékok esetében vizsgáltuk a termékek gyűrűbővítési lehetőségeit Baeyer-Villiger-oxidációs és Beckmann-átrendeződési reakciókban. Elképzeléseink szerint az így nyert spiro-ciklusos vegyületek gyűrűnyitása nukleofilekkel új típusú C-glikozil-vegyületek (pl. amino- és hidroxikarbonsav konjugátumok) előállítását teheti lehetővé, azonban ezekben a reakciókban a nukleofil reagensekre érzékeny acil-védőcsoportok lehasadása is bekövetkezhet. Kutatásunk célja tehát ezen cikloaddíciós és gyűrűnyitási reakciók vizsgálatának a kiterjesztése olyan védőcsoportokkal ellátott *exo*-glikálokra (pl. per-*O*-alkilezett), melyek gyűrűnyitása a védőcsoportok sérülése nélkül, szelektíven is kivitelezhető.

Vegyészmérnök BSc szakdolgozat 1 hallgató

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)

Új spirociklusos glikomimetikumok előállítása

A szénhidrátok számos biológiai folyamatban vesznek részt, ez motiválja a szénhidrátokon alapuló terápiák kifejlesztését. Mindezek ellenére csak kevés szénhidrát alapú gyógyszer ismert.

A kutatás célja potenciálisan bioaktív spirociklusos szénhidrátok tervezése és előállítása az alábbi három terület valamelyikén:

a) Új útvonalakat tervezünk vizsgálni szénhidrát-spiro-morfolinok előállítására, mivel jelenleg nem ismert hatékony és általános módszer a szintézisükre. Ezek az antioxidáns hatású

spiroalkaloidok és analógjaik ígéretesek lehetnek a diabéteszes nefropátia, kardiovaszkuláris és más betegségek kezelésére, melyek kialakulásában és előrehaladásában a reaktív oxigéntartalmú részecskék szerepet játszhatnak.

b) Egy glikózaminoglikánok (GAG) szintézisében érintett galaktozil transzferáz enzim (β 4GalT7) xilopiranozilidén-spirociklusos szubsztrátjainak az előállítását is tervezzük. A célvegyületek a GAG szintézis gátlásával tumorelles hatásúak lehetnek, továbbá indukálhatják citotoxikus GAG-ok képződését.

c) Ribofuranozilidén-spirociklusok szintézise, melyek hatásosak lehetnek *Helicobacter pylori*val szemben. Ez a baktérium összefüggésbe hozható olyan emésztőrendszeri betegségekkel, mint a gyomorrák. Cél a *H. pylori* adeniloszukcinát szintetáz szelektív inhibitorainak a szintézise, melyek gátolják a baktérium fennmaradásához szükséges purin ellátást.

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 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.

Mándi 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

Szakdolgozat (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

Szakdolgozat (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

Szakdolgozat (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 eltolódási értékek számítása és kísérleti értékekkel való összevetés révén.

Máondi Attila

Szakdolgozat (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

Szakdolgozat / 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.

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.

Dr. Timári István, tudományos munkatárs

email: timari.istvan@science.unideb.hu

Szerkezeti Biológiai, Molekuláris Felismerés és Kölcsönhatás Kutatócsoport

NMR Kutatólaboratórium

honlap: <https://debnmr.unideb.hu/>

BSc szakdolgozat és MSc diplomamunka témák:

1. Korszerű NMR módszerek alkalmazása biológiailag aktív vegyületek szerkezetvizsgálatára

Egy molekula biológiai aktivitását elsősorban az adott molekula szerkezete határozza meg. A mágneses magrezonancia (NMR) spektroszkópia az egyik leghatékonyabb eszköz molekulák szerkezetének atomi szintű tanulmányozására. Például a gyógyszerfejlesztés területén megjelenő egyre szigorúbb követelményeknek, és ezáltal az egyre növekvő számú, elvégzendő mérésnek köszönhetően, folyamatos igény mutatkozik olyan modern NMR kísérletekre, amelyek a lehető legtöbb információt szolgáltatják a lehető legrövidebb idő alatt. Új NMR módszereink alkalmazásával szeretnénk a biológiailag aktív molekulák (például szénhidrátok, peptidek, fémion komplexek) szerkezetvizsgálatát hatékonyabbá tenni.

2. Metabolomikai minták elemzése többdimenziós NMR módszerek segítségével

A metabolomikában, azaz az anyagcseretermékek szisztematikus vizsgálatában, az egydimenziós (1D) ^1H NMR a leggyakrabban használt NMR módszer egyszerűségének és kiváló érzékenységének köszönhetően. Azonban az összetett metabolomikai minták 1D ^1H spektrumai általában rendkívül zsúfoltak, ami sok metabolit beazonosítását illetve mennyiségi meghatározását lehetetlenné teszi, ezáltal potenciálisan értékes információk elvesztését okozza. A modern, többdimenziós NMR módszerek megoldást jelenthetnek ezen problémák jelentős részére, ezáltal pontosabbá tehetik a metabolomikai minták karakterizálását.