

**A Szerves Kémiai Tanszék szakdolgozat és diplomamunka témái  
a 2023/2024. tanév I. félévére**

**Prof. Dr. Batta Gyula**

Kémiai Intézet és Biológiai és Ökológiai Intézet, Szerkezeti Biológiai és Molekuláris  
Felismerési Kutatócsoport, honlap: [structbiol.unideb.hu](http://structbiol.unideb.hu)  
Kémiai épület fszt. E-18 iroda és B-13 fehérje labor  
e-mail: [batta@unideb.hu](mailto:batta@unideb.hu)

**BSc szakdolgozat vagy MSc diplomamunka (1 hallgató)**

**Antimikrobiális hatású fehérjék szerkezete és interakciói NMR és  
in-silico módszerekkel**

**Dr. Bokor Éva**

Kémiai Intézet  
Kémiai Glikobiológiai Kutatócsoport  
Kémiai épület E-423  
e-mail: [bokor.eva@science.unideb.hu](mailto:bokor.eva@science.unideb.hu)

**MSc diplomamunka (1 hallgató)**

**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 diplomamunka keretében ilyen heterociklusos monoszacharid származékok szintézisét, valamint a fordított elektronigényű Diels-Alder reakcióik tanulmányozását tervezzük.

### **BSc szakdolgozat, MSc diplomamunka (1-1 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. A szerkezet-hatás vizsgálatok tanulmányozására a szakdolgozat/diplomamunka keretében új glikopiranozil-heterociklusok és félszendvics komplexeik szintézisét fogjuk vizsgálni.

### **BSc szakdolgozat, MSc diplomamunka (1-1 hallgató)**

#### **C-Glükopiranozil-heterociklusok, mint potenciálisan duális hatású SGLT2-GP inhibitorok előállítása**

Napjainkban egyre nagyobb az érdeklődés az ún. több-célponton ható gyógyszerjelöltek kifejlesztése iránt, melyek alkalmazása új kezelési lehetőségeket jelenthet olyan összetett betegségek esetében, mint pl. a rák vagy a II. típusú cukorbetegség. Az elmúlt tíz évben több C-( $\beta$ -glükopiranozil-*aril*)metil-(*het*)arén típusú vegyület került orális antidiabetikus szerként forgalomba. Ezek a cukorszármazékok, az ún. gliflozinok a vesében működő nátrium-függő glükóz ko-transzporter 2 (SGLT2) fehérje működését gátolják és cukorvizelet előidézve csökkentik a cukorbetegek vércukorszintjét. A májban működő glikogén foszforilázt (GP) szintén potenciális terápiás célpontként tartják számon. Az enzim gátlása révén a glükóz termelés visszaszorításával lehetne elérni a diabéteszes páciensek vércukorszintjének normalizálását. A GP leghatékonyabb, nanomólos gátlószerei között C-( $\beta$ -glükopiranozil-*hetaril*)arén típusú vegyületek is találhatóak. A közelmúltban e vegyületcsaládon belül olyan származékokat azonosítottunk, melyek a GP gátlás mellett mikromólos SGLT2 inhibíciót is kiváltottak. A szakdolgozat/diplomamunka során e duális hatású vegyületcsoport további származékainak a szintézisét tervezzük. Az új vegyületek várhatóan a hatékony GP inhibíciós készségeket megtartva javuló SGLT2 gátló tulajdonságot fognak mutatni.

**Dr. Juhász László**

Kémiai Intézet

Kémiai Glikobiológiai Kutatócsoport

Kémiai épület E-409, E-421

e-mail: [juhasz.laszlo@science.unideb.hu](mailto:juhasz.laszlo@science.unideb.hu)

### **Vegyész MSc diplomamunka 1 hallgató**

#### **1-C szubsztituált glikál származékok Heck kapcsolási 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 reakcióköörülményektől függően ionos vagy gyökös mechanizmus szerint játszódhatnak le. A glikálok addíciós reakcióit magas regioselektivitás 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  $-CN$ ,  $-COOMe$ , vagy  $-CONH_2$  csoportot tartalmaznak. A vegyületek előállítására szolgáló szintézismódszert kutatócsoportunkban dolgozták ki. A kutatómunka során tervezzük az 1-C szubsztituált-2-jód glikálok előállítását, és az így nyert vegyületek palládium katalizált Heck reakcióinak a tanulmányozását. Tanulmányozni tervezzük, a kapcsolási reakcióval előállított dién származékok termikus és fotolitikus cikloaddíciós reakcióját, új típusú, kondenzált többgyűrűs rendszerek előállítása céljából

**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**

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,  $^{13}\text{C}$ - és  $^1\text{H}$ -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. Timári István, tudományos munkatárs**

Kémiai Intézet

Szerkezeti Biológiai, Molekuláris Felismerés és Kölcsönhatás Kutatócsoport

NMR Kutatólaboratórium

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

email: timari.istvan@science.unideb.hu

**BSc szakdolgozat és MSc diplomamunka téma:**

**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. A szakdolgozat/diplomamunka során a hallgató elsajátítja a modern 2D NMR kísérletek alapjait, kiértékelési lehetőségeit, és a témavezető irányításával alkalmazza ezeket valamilyen potenciálisan biológiailag aktív molekula (például szénhidrát, peptid) szerkezetvizsgálatára.

**Vágvölgyiné Dr. Tóth Marietta és Dr. Kaszás Tímea**

Kémiai Intézet

Kémiai Glikobiológiai Kutatócsoport

Kémiai épület E-409

e-mail: [toth.marietta@science.unideb.hu](mailto:toth.marietta@science.unideb.hu)

e-mail: [kaszas.timea@science.unideb.hu](mailto:kaszas.timea@science.unideb.hu)

**MSc diplomamunka téma: (1 hallgató)**

**Glikopiranozilidén-spiro-izoxazolinok szintézise**

A szakdolgozat során szénhidrát-szubsztrátokon tervezünk új vegyületeket előállítani és új szintézismódszereket kidolgozni. Ezzel potenciálisan biológiailag aktív vegyületeket nyerhetünk. A kutatócsoportunkban anhidro-aldóz szemikarbazonok transziminálási reakciójával oximokat állítottunk elő, melyekből nitril-oxidok generálhatók. Ezen közttermékek változatos módon tovább alakíthatók. A kutatások során a nitril-oxidok reakcióit kívánjuk tanulmányozni *exo*-glikálokkal, mely során glikopiranozilidén-spiro-izoxazolinokat kaphatunk.