

## Fizikai Kémiai Tanszék záródolgozati témák 2023/24/2. félév

### Bényei Attila:

**Átmenetifém komplexek szerkezetének vizsgálata egykristály röntgendiffrakcióval** (vegyész/vegyészmérnök MSc, kémia/vegyészmérnök BSc, 1 fő, 1 szabad szabad hely)  
A feladat az egykristály röntgen diffrakciós szerkezet meghatározáshoz használt alapvető programok megismerése, néhány szerkezet megoldása és finomítása. Cél modern egykristály röntgendiffrakciós készülék használatának elsajátítása.

**Gyógyszerhatóanyag polimorfjainak előállítása és szerkezet meghatározása pordiffrakciós adatokból** (vegyész/vegyészmérnök MSc, kémia/vegyészmérnök BSc, 1 fő, 1 szabad)

Gyógyszerhatóanyag polimorfjainak előállítása és szerkezet meghatározása pordiffrakciós adatokból Az ab initio szerkezet meghatározás, amikor közvetlenül a pordiffrakciós adatokból határozzuk meg mikrokristályos anyagok szerkezetét a diffrakciós kutatások élvonalába tartoznak. A feladat az alapvető software eszközök elsajátítása és használata ebben a témában.

**Krisztallográfiai adatbázisok használata, molekulacsaládok összehasonlítása** (vegyész/vegyészmérnök MSc, kémia/vegyészmérnök BSc, 1 fő, 1 szabad hely)

Egy megadott molekulacsalád krisztallográfiai adatbázisban való keresése és a szerkezetek összehasonlítása. A másodlagos kölcsönhatások elemzése.

### Czégéni Csilla Enikő:

**Vízoldható N-heterociklusos ligandumok és átmenetifém komplexeik szintézise (szerkezetvizsgálat, katalitikus tulajdonságok vizsgálata hidrogén tárolására alkalmas katalitikus rendszerekben)** (kémia vagy vegyészmérnök BSc, 1 szabad hely)

Tervezzük vízoldható ligandumok és komplexeik előállítását, az előállított komplexek szerkezetének felderítését spektroszkópiai módszerekkel és katalitikus tulajdonságaiknak vizsgálatát vizes közegű homogénkatalitikus hidrogéntárolásban. Az új komplexekkel részletesebben tanulmányozni szeretnénk a formiát bontás/hidrogén-karbonát redukció katalitikus ciklust, mint lehetséges hidrogéntároló rendszert.

### Czégéni Csilla Enikő, Udvardy Antal:

**Foszfa-urotropinok Ag(I)-komplexeinek tanulmányozása**

(kémia vagy vegyészmérnök BSc, levelező vegyészmérnök BSc van szabad hely)

A PTA (PTA: 1,3,5-triaza-7-foszfaadamantán) és származékainak az ezüst(I)-ionnal képzett komplexeinek jellemzése folyadék és szilárd fázisban. Új Ag-foszfaurotropin komplexek irodalmi feldolgozása.

### **Hollóczki Oldamur:**

#### **Fehérjék és műanyag nanorészecskék kölcsönhatásának vizsgálata (1 fő, betelt)**

Műanyag hulladék aprózódásával keletkező nanoműanyagok és humán szérum albumin kölcsönhatásának vizsgálata számítógépes modellezéssel. A munka során a fehérje szerkezetének változásairól kaphatunk információt.

#### **Triazólium sók katalizálta formóz reakció vizsgálata számítós kémiai módszerekkel (1 fő, betelt)**

A munka során kvantumkémiai számításokkal szándékozunk felderíteni, hogy triazólium sók miképpen katalizálják a formaldehid átalakulását szénhidrátokká. A keletkező szénhidrátkeverék összetételének befolyásoláshoz a számítások segítségével megtervezzük a megfelelő katalizátort.

### **Kálmán Ferenc:**

**Cu(II) megkötésére alkalmas biciklusos komplexképző ligandum előállítása és komplexének koordinációs kémiai vizsgálata.** (kémia és vegyészmérnök BSc, vegyész, vegyészmérnök MSc)

**Karban merevített komplexképzők szintézise és fémkomplexeik koordinációs kémiai jellemzése** (kémia és vegyészmérnök BSc, vegyész, vegyészmérnök MSc)

### **Kéri Mónika, Papp Vanda:**

**Környezeti porózus adszorbensek szerkezetének NMR vizsgálata** (kémia tanár, vegyész/vegyészmérnök MSc, 2 fő, foglalt)

A természetes vizekben, talajokban előforduló környezetszennyező anyagok eltávolítására megoldást jelenthet azok megkötése pórusos anyagok segítségével. Erre leginkább a nanométeres pórusokat tartalmazó, nagy fajlagos felületű anyagok alkalmasak, mint például a környezetünkben előforduló talajalkotó agyagásványok, illetve a mesterségesen előállított szén alapú nanorendszerek (pl.: szén aerogélek). Az alkalmazás körülményei miatt fontos a szilárd anyag és a folyékony közeg kölcsönhatásának vizsgálata, a szilárd anyag pórusszerkezetének, szerves szennyezőkkel való felületi reakcióinak leírása. A cél tehát a pórusos anyagok folyékony közeggel való kölcsönhatásának átfogó jellemzése olyan mágneses magrezonanciás módszerek alkalmazásával, mint az NMR krioporozimetria, relaxometria és diffúziometria.

### **M. Nagy Noémi:**

**Diffúziós és adszorpciós vizsgálatok agyag-kettőshidroxid kompozitmintákban radioizotópos nyomjelzéssel** (2 fő kémia, vegyész, vegyészmérnök hallgató, BSc ill. MSc szint)

A kis és közepes aktivitású radioaktív hulladékok földalatti tárolásánál agyagkőzeteket és betont használnak mérnöki gátként, a természetes gátat pedig a környező földtani képződmények (kőzetek) képzik. A biztonságos hulladéktárolás fontos feltétele, hogy ezek a gátak megakadályozzák a radioaktív izotópok szétterjedését a környezetben. A szétterjedés mértékét a vízmozgás és az izotópok megkötődése együtt határozza meg. A természetes kőzeteken a kationok kötődnek meg, az anionok megkötése problémás. Ezért olyan kompozitanyagot állítunk elő, amely természetes agyagkőzetet és anioncserélő kettős hidroxidot együtt tartalmaz és ezen vizsgáljuk radioaktív izotópok migrációját.

### **Novák Levente:**

**Amid kötés kialakítása termikus reakcióval poláris aprotikus közegben** (MSc diplomamunka, 1 fő)

A karboxil- és amino csoportok között kondenzációval létrejött amid kötés nagy jelentőséggel bír a szerves makromolekulák felépítésében jó hidrolitikus stabilitása és poláris természete miatt. Protikus oldószerben (így vízben) azonban csak kerülő úton állítható elő a megfelelő aminből és karbonsavból a kiindulási anyagok disszociációja miatt. Kevésbé ismert azonban, hogy aprotikus oldószerben termikus kondenzációval közvetlenül is képződnek amidok. A képződést feltehetően a megváltozott sav-bázis viszonyok teszik lehetővé, a reakcióegyensúlyt pedig az oldószer vizet szolvatáló képessége tolja el a képződés irányába. Tervezzük a reakció kinetikai vizsgálatát kismolekulákkal, valamint polimerekkel, különös tekintettel az aprotikus oldószerben fellépő sav-bázis viszonyokra.

**Funkcionalizált makromolekulák szintézise és jellemzése** (MSc diplomamunka, 1 fő, betöltve)

A makromolekulák tulajdonságait kémiai összetételükön kívül nagymértékben befolyásolják egyéb tényezők, mint például a szénlánc szerkezete, a polimer molekulatömege és molekulatömeg-eloszlása, az egyes funkciós csoportok térbeli helyzete és egymástól való távolsága. Megfelelő csoportokkal funkcionalizált makromolekulák kitűnő ligandumai lehetnek különböző fémionoknak és az így létrejött komplexek a kismolekulák komplexeihez képest számos előnnyel rendelkeznek (csökkent diffúziós sebesség, könnyű elválaszthatóság, specifikus szelektivitás, kinetikai stabilitás). Az előállítani kívánt specifikus tulajdonságú makromolekulák szintézise részint monomeregységek összekapcsolásával, részint meglévő polimerek (úgynevezett platformok) módosításával történik.

Fontos lépés a termék alapos megtisztítása a reakció kiindulási anyagaitól és a melléktermékektől. A szintézist és tisztítást követően vizsgálni fogjuk a létrejött makromolekulák alapvető tulajdonságait és/vagy az adott felhasználási területhez (kolloidális katalízis, környezetvédelem, mágneses kontrasztanyagok) legalkalmasabb fémkomplexeik viselkedését.

### **„Ritka(föld)fém kutatócsoport”**

A „Ritka(föld)fém kutatócsoport” főleg biológiai szempontból fontos (esszenciális, ill. toxikus), valamint az orvosi képalkotó diagnosztikában (pl. mágneses rezonanciás képalkotás (MRI), pozitron emissziós tomográfia (PET), stb.) és terápiában (nukleáris medicina) alkalmazható fémionok (alkáliföldfémek, ritkaföldfémek, néhány átmenetifém és a 13.

főcsoport) koordinációs kémiájával foglalkozik. A fémionok nyíltláncú és makrociklusos poliaza–poli-karboxilát, –foszfonát, –foszfinát, pikolinát, amidát valamint újabban 8-oxikolinát komplexeit állítjuk elő, vizsgáljuk ezek fizikai-kémiai sajátosságait (egyensúly, képződés és bomlás-kinetika, kontrasztnövelő hatás, stb.) és szerkezetét. Újabban „intelligens” és bimodális (MRI – PET, MRI – optikai stb.) kontrasztanyagok előállítására alkalmas ligandumok tervezésével, szintézisével is foglalkozunk. Az alkalmazott technikák tekintetében, pH-potenciometria (egyensúlyi mérések), UV-látható spektrofotometria (egyensúlyi és kinetikai mérések), spektrofluorimetria (egyensúlyi és kinetikai mérések), valamint egy, ill. többdimenziós és TD NMR ( $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$ ,  $^{17}\text{O}$  és  $^{31}\text{P}$ ), ill. HPLC-s (analitikai és preparatív) módszerekre alapozunk.

### **Csupász Tibor**

**Inert bifunkciós Mn(II)-komplexek előállítása és koordinációs kémiai jellemzése - "Szintetikus érzékenyítés"** (Kémia BSc/Vegyész MSc, 1 fő, szabad)

### **Tircsó Gyula**

**Nagy üregmérettel rendelkező pikolinátszármazék komplexképzők előállítása Ba<sup>2+</sup>/Ra<sup>2+</sup> fémionok komplexálására** (Kémia BSc/MSc, 1 fő, szabad)

### **Váradi Balázs és Tircsó Gyula**

**Design, synthesis and characterization of Mn(II)-based smart contrast agent candidates** (Chemistry BSc or MSc, 1 person, free)

### **Szilágyi Balázs és Tircsó Gyula**

**Nyíltláncú pikolinátszármazék kelátorok Y(III)-komplexei: egyensúly és disszociációs kinetika**

### **Kapus István és Tircsó Gyula**

**Kelátorok előállítása Zr(IV)-komplexálása céljával** (Kémia BSc, 1 fő, szabad)

### **Udvardy Antal:**

**Átmenetifém-foszfin komplexek alkalmazása a hidrogéntárolásban** (kémia vagy vegyészmérnök BSc, van szabad hely)

A Fizikai Kémiai Tanszéken több olyan átmenetifém-foszfin komplexet állítottunk elő, melyek katalizálják a vizes közegű HCOONa és hangyasav dehidrogénezését. A reakcióban képződő gázokat gázvolumetriásan követjük, a formiát meghatározását pedig modern HPLC-vel végezzük. A hallgató feladata a hangyasav, nátriumformiát, és glükóz bontásának, illetve a szén-dioxid és a bikarbonát hidrogénezésnek tanulmányozása.

**Szilárd fázisú reakciók irodalmi feldolgozása** (levelező vegyészmérnök Bsc, van szabad hely)

A hallgató feladata szilárd fázisú (mechanokémiai) reakciók (fémorganikus vegyületek előállítása, szerves kémiai reakciók stb.) irodalmi feldolgozása.