

Fizikai Kémiai Tanszék záródolgozati témák 2021/22/1. félév

Bányai István:

Egyoldalú NMR relaxometriás (NMR-MoUSE) vizsgálatok kolloidok és gélek körében (kémia/vegyésszámológus BSc, vegyész/vegyésszámológus MSc, 1 fő, 1 szabad hely)

Az NMR MoUSE (Mobile Universal Surface Explorer) olyan relaxometriás technika, amellyel állandó nagy mágneses gradiens térben lehet méréseket végezni. Nagyméretű minták vizsgálatára alkalmas. Segítségével kémiai csere-folyamatok és a diffúziósebesség határozható meg.

Amfifil molekulák asszociációs viselkedésének vizsgálata nagy felbontású NMR spektroszkópiás módszerekkel

(vegyész/vegyésszámológus MSc, 1 fő, 1 szabad hely)

Tenzidek vizes oldataiban a kritikus micellaképződési koncentráció (CMC) felett micellák képződnek. A folyamat jól vizsgálható az amfifil molekulák és a képződő micellák öndiffúzióján keresztül, amely a PGSE impulzustechnikával NMR-rel jól mérhető.

Bénevi Attila:

Átmenetifém komplexek szerkezetének vizsgálata egykristály röntgendiffrakcióval (vegyész/vegyésszámológus MSc, kémia/vegyésszámológus BSc, 1 fő, 1 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.

Folytonos szimmetria mérték hidrogén hidas szerkezetek összehasonlításában (vegyész/vegyésszámológus MSc, kémia/vegyésszámológus BSc, 1 fő, 1 szabad hely)

A hidrogénkötéses szerkezetek összehasonlításában egy lehetőség a folytonos szimmetria mérték alkalmazása. A cél nagy koordinációs számú átmenetifém komplexek koordinációs módjának újszerű leírása, ami figyelembe veszi, hogy a fém-donor távolság széles határok között változhat. Főleg krisztallográfia adatbázis lekérdezését és az adatok feldolgozását jelenti a munka.

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

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/vegyésszámológus MSc, kémia/vegyésszámológus BSc, 1 fő, 1 szabad hely)

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

PETN-reduktáz homológjai röntgendiffrakciós szerkezeteinek összehasonlító elemzése (vegyész/vegyésszámológus MSc, kémia/vegyésszámológus BSc, 1 fő, 1 szabad hely)

A pentaeritrol-trinitrát reduktáz enzim lényeges szerepet játszik a trinitro-toluol biológiai lebomlásában. A feladat különböző szubsztrátum molekulákkal képezett komplexek, illetve a hasonló enzimek szerkezetének összehasonlítása. A feladat fehérjekristallográfiai programcsomagok használatának elsajátítása példákon keresztül, a PETN-reduktáz kristályairól gyűjtött adatok feldolgozása, a szerkezet megoldása.

Use of crystallographic database (Chemist/Chemical Engineer MSc or BSc, 1 person, 1 free place)

Comparison of several structures determined by single crystal X-ray diffraction by using the Cambridge Structural Database. Analysis and comparison of secondary interactions and metal coordination in case of transition metal complexes. Learning the use of crystallographic software packages.

Nitro-aromások hidrogénezéséhez használt katalizátorok vizsgálata (1 fő, vegyész MSc, nincs szabad hely)

Külső konzulens: Dr. Magyar Miklós, BorsodChem Zrt.

Hidrogénező reaktor teljesítőképességének vizsgálata és alkalmazása az üzemi folyamatok jobb megértésében.

Buzetzký Dóra Beáta és Kovács Eszter Mária

Réteges kettős hidroxid (LDH)-tartalmú bentonit hibrid anyag szorpciós és migrációs tulajdonságainak vizsgálata (vegyész/vegyésszámológus MSc, 2 fő, nincs szabad hely)

A radioaktív hulladékok tárolására alkalmas mélygeológiai tároló egyik részeként a bentonit agyagkőzetet tartják a legalkalmasabbnak a világon. A kutatások azt mutatják, hogy az anionos radionuklidok viszonylag hamar áthatolnak ezen az agyagkőzeten. Az LDH pedig anionokat képes megkötni pozitív rétegtöltésének köszönhetően. Mivel vizes közegben kationos és anionos radionuklidok együtt fordulnak elő, így együtt kellene tudnunk őket megkötni. A vizsgálat célja, hogy a réteges kettős hidroxid (LDH)-tartalmú bentonit hibrid anyag szorpciós és migrációs tulajdonságait vizsgáljuk anionos és kationos radionuklidok alkalmazásával.

La/Lu - és Y/La - bentonit keverék szorpciós/desorpciós vizsgálata (vegyésszámológus vagy kémia BSc., MSc. 2 fő, 1 szabad hely)

Czégény Csilla:

Vízoldható N-heterociklusos átmenetifém karbén komplexek előállítása és katalitikus tulajdonságainak vizsgálata (Vegyésszámológus MSc diplomamunka, 1 fő, nincs szabad hely)

Az utóbbi évtizedekben a vízoldható karbén ligandumot tartalmazó fémkomplexek jelentős szerephez jutottak a fémorganikus katalízisben. Az N-heterociklusos karbénok közül főként a különféle imidazolium-származékok rendkívül stabilis komplexeket képeznek az alacsony oxidációs állapotú fémionokkal és előnyös tulajdonságokkal bírnak a tercier foszfin ligandumokkal szemben. Ezek a komplexek általában az imidazolium só valamiféle módosításával (pl. szulfonálás) tehetők vízoldhatóvá. A vizes/szerves kétfázisú katalízisre

alkalmas vízdoldható karbén komplexek száma csekély. Bár viszonylag kevés ipari eljárás épül vizes közegű katalitikus folyamatra, a vizes-szerves kétfázisú rendszerek alkalmazása előnyös lehet, ugyanis az ilyen rendszerek gyakran lehetővé teszik a termékek hatékony elválasztását és az aktív, drága katalizátor gazdaságos visszanyerését.

Garda Zoltán:

¹⁹F tartalmú nyíltláncú és makrociklusos ligandumok Mn(II) és Fe(III)-ionokkal képződő komplexeinek egyensúlyi, ¹H- és ¹⁹F-relaxometriás és kinetikai jellemzése. (kémia vagy vegyészmérnök BSc, 2 fő, nincs szabad hely)

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–polikarboxilát, –polifoszfonát, –polifoszfinát és –poliamidát komplexeit állítjuk elő, vizsgáljuk ezek fizikai-kémiai sajátosságait (egyensúly, képződés és bomlás-kinetika, kontrasztnövelő hatás) és szerkezetét. Újabban „intelligens” 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), NMR (¹H, ¹³C, ¹⁹F, ¹⁷O, ¹⁹F, ³¹P, ²³Na, ⁴⁵Sc, ⁷¹Ga, ¹¹⁵In, ¹⁹⁵Pt, ^{203/205}Tl és a ²⁰⁹Bi) egy, ill. többdimenziós és TD, ill. HPLC-s (analitikai és preparatív) módszerekre alapozunk.

Horváth Henrietta, Marozsán Natália:

Vízdoldható Ir(I)-karbén-foszfin komplexek előállítása és katalitikus tulajdonságainak vizsgálata (Vegyészmérnök BSc szakdolgozat, 1 fő, nincs szabad hely)

Vízdoldható Ir(I)-komplexek előállítása, elsősorban karbén és foszfin ligandumokkal. Az előállított komplexek szerkezetének felderítése, katalitikus tulajdonságainak vizsgálata, hidrogénezési-dehidrogénezési, hidrogénátviteli reakciókban. A komplexek katalitikus aktivitásának tanulmányozása, formiát alapú és egyéb szerves folyékony hidrogéntároló rendszerekben.

Kálmán Ferenc:

Karban merevített aminopolikarboxilát ligandum Mn(II)-komplexének vizsgálata. (vegyészmérnök és kémia BSc, MSc, 1 fő)

Bi- és triciklusos N-donoratomot tartalmazó makrociklusok Cu(II)-komplexeinek vizsgálata (vegyészmérnök és kémia BSc, MSc, 1 fő)

Az [Mn(OPC2A2AMsarc)] oldategyensúlyi vizsgálata: egyensúly, kinetika és relaxáció (vegyészmérnök BSc, 1 fő, nincs szabad hely)

Oldalláncban merevített piklén származék ligandum előállítása és fémionokkal kialakuló komplexei koordinációs kémiai vizsgálata (vegyésszámőrök BSc, 1 fő, nincs szabad hely)

Bi- és triciklusos N-donoratomot tartalmazó makrociklusok előállításának optimalizálása (vegyésszámőrök BSc, 1 fő, nincs szabad hely)

Egy OPC2AM származék ligandum Mn(II)-komplexének koordinációs kémiai vizsgálata (vegyésszámőrök BSc, 1 fő, nincs szabad hely)

A PBHA ligandum Sb(III)-komplexének koordinációs kémiai vizsgálata (vegyésszámőrök BSc, 1 fő, nincs szabad hely)

Kéri Mónika:

Környezeti porózus adszorbensek szerkezetének NMR vizsgálata

(kémia BSc, 2 fő, nincs szabad hely)

A természetes vizekben, talajokban előforduló környezetszennyező anyagok eltávolítására megoldást jelenthet azok megkötése porózus anyagok segítségével. Erre leginkább a nanométeres porózusokat 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 porússzerkezetének, szerves szennyezőkkel való felületi reakcióinak leírása. A cél tehát a porózus anyagok és azok közeggel való kölcsönhatásának átfogó jellemzése olyan mágneses magrezonanciás módszerek alkalmazásával, mint az NMR krioporozimetria, relaxometria és diffúziometria.

Kéri Mónika, Nyul Dávid:

Rezorcín-aceton polimer aerogél előállítása és jellemzése

(vegyész/vegyésszámőrök MSc. 1 fő, nincs szabad hely)

A hallgató feladata rezorcín-aceton kopolimerek előállítása és keresztkötése oldat fázisban. Szuperkritikus szárítás után a keletkezett polimer aerogélek porózus szerkezetét különböző módszerekkel jellemezzük folyadék közegben, úgymint NMR krioporozimetria, relaxometria és az eredményeket összevetjük más módszerekkel mért értékekkel (SEM, pásztázó elektronmikroszkópia, és gázadszorpció). Az aerogél mechanikai tulajdonságait DMA (Dinamikus Mechanikai Analízis) segítségével vizsgáljuk.

M. Nagy Noémi és Kovács Eszter Mária:

Diffúziós és adszorpció vizsgálatok agyag-kettőshidroxid kompozitmintákban radioizotópos nyomjelzéssel (vegyésszámőrök BSc, 1 fő, nincs szabad hely)

A kis és közepes aktivitású radioaktív hulladékok földalatti tárolásánál agyagkőzeteket és betont használnak mérnöki gátként, a természetes gátat pedig a környező földtani képződmények (kőzetek) képezik. 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.

Lantanoida-bentonitok szerkezeti változása hőkezelés hatására (vegyéssz mérnök vagy kémia BSc., MSc. 1 fő, 1 szabad hely)

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.

Formation of amide bond by thermal reaction in polar aprotic medium (MSc thesis, 1 person)

The amide bond formed by condensation between carboxyl and amino groups is of great importance for the synthesis of organic macromolecules owing to its hydrolytic stability and polar nature. In protic solvents (thus in water) it can only be formed indirectly from the appropriate amine and carboxylic acid due to the dissociation of these precursors. It is less known however, that in aprotic solvents amides can also form directly by thermal condensation. The reaction is probably made possible by the changed acid-base conditions, while the reaction equilibrium is shifted to the direction of the formation by the water solvation capacity of the solvent. We plan to investigate the kinetics of the reaction with small molecules, as well as with polymers, with special emphasis given to the acid-base conditions existing in the aprotic solvent.

Funkcionalizált makromolekulák szintézise és jellemzése (BSc szakdolgozat, 1 fő, MSc diplomamunka, 1 fő)

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.

Synthesis and characterization of functionalized macromolecules (MSc thesis, 1 person)

The properties of macromolecules are strongly influenced besides their chemical composition by other factors, as e.g. the structure of the carbon chain, the molecular weight and weight distribution of the polymer, spatial position of certain functional groups and their mutual distance. Macromolecules functionalized by suitable groups can be excellent ligands for different metal ions and the complexes so formed possess several advantages over the complexes of small molecules (decreased diffusion rate, easy separability, specific selectivity, kinetic stability). The synthesis of these macromolecules with specific properties is performed partly by linking together monomeric units, partly by the modification of existing polymers (called platforms).

Purification of the product from the starting materials and the byproducts of the reaction is an important step. Following the synthesis and the purification we will investigate the main properties of the macromolecules formed and/or the behavior of their most suitable metal complexes for a given area of application (colloidal catalysis, environmental protection, magnetic contrast agents).

Purgel Mihály:

Átmenetifém-komplexek szerkezetvizsgálata kvantumkémiai módszerekkel
(kémia/vegyészmérnök BSc, 2 fő, 1 szabad hely)

Átmenetifém-komplexek szerkezeti paramétereinek meghatározása kvantumkémiai számításokkal, a lehetséges izomerek felderítése, illetve reakcióik mechanizmusvizsgálata.

Természetben előforduló vegyületek szerkezetvizsgálata kvantumkémiai módszerekkel
(kémia/vegyészmérnök BSc, 1 fő, nincs szabad hely)

Természetben előforduló vegyületek szerkezeti paramétereinek meghatározása kvantumkémiai számításokkal, a lehetséges izomerek felderítése, illetve reakcióik mechanizmusvizsgálata.

Tircsó Gyula:

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 fémek) koordinációs kémiájával foglalkozik. A fémionok nyíltlancú és makrociklusos poliaza–polikarboxilát, –polifoszfónát, –polifoszfínát és –poliamidát komplexeit állítjuk elő, vizsgáljuk ezek fizikokémiai sajátosságait (egyensúly, képződés és bomlás-kinetika, kontrasztnövelő hatás), ill. szerkezeti aspektusait. Újabban okos/„intelligens” (pl. pH-érzékeny, Zn²⁺-koncentrációjára érzékeny stb.), ill. bimodális (MRI – PET, MRI –optikai stb.) kontrasztanyagok előállítására alkalmas ligandumok tervezésével, szintézisével és

jellemzésével is foglalkozunk. Az alkalmazott technikák tekintetében a pH-potenciometria (egyensúlyi mérések), UV-látható spektrofotometria (egyensúlyi és kinetikai mérések), spektrofluorimetria (egyensúlyi és kinetikai mérések), NMR (^1H , ^{13}C , ^{17}O , ^{19}F , ^{31}P stb. szerkezeti, ill. dinamikai információk nyerésére) egy, ill. több-dimenziós és TD, ill. HPLC-s (analitikai és preparatív) módszereket alkalmazzuk gyakran a kutatásaink során.

Mn²⁺-alapú MRI kontrasztanyag-jelöltek előállítása és jellemzése. (vegyéssz mérnök BSc, kémia BSc, 1 fő)

Tircsó Gyula és Csupász Tibor:

Bi(III)-ion komplexálására alkalmas ligandumok előállítása (Vegyéssz mérnök és kémia BSc, ill. vegyész MSc hallgatók, 1 fő)

Tircsó Gyula és Madarasi Enikő:

Mn(II)-alapú okos/intelligens kontrasztanyagok: előállítás és kémiai jellemzés (Vegyéssz mérnök és kémia BSc, ill. vegyész MSc hallgatók, 1 fő)

Tircsó Gyula és Váradi Balázs:

Bifunkciós ligandumok előállítása diagnosztikai értékű fémionok komplexálására (Vegyéssz mérnök és kémia BSc, ill. vegyész MSc hallgatók, 1 fő):

Tóth Imre és Csupász Tibor:

Szimmetrikus szerkezetű Bi(III)komplexek vizsgálata oldatban NMR spektroszkópiával (vegyész MSc, vegyéssz mérnök MSc, 1 fő)

(CN)₅Pt komplex reakciója kis szerves ligandumokkal (vegyész MSc, vegyéssz mérnök MSc, 1 fő)

Udvardy Antal, Szolnoki Csenge Tamara:

Ru(II)-foszfa-urotropin komplexek a hidrogéntárolásban (kémia/vegyéssz mérnök Bsc, 1 fő, nincs szabad hely)

Ru-PTA (PTA = foszfaurotropin) komplexek alkalmazása a formiátbontásban (kémia vagy vegyéssz mérnök BSc, 1 fő, nincs szabad hely)

A Fizikai Kémiai Tanszéken több olyan Ru(II)- PTA (PTA: 1,3,5-triaza-7-foszfaadamantán) komplexet állítottunk elő, melyek katalizálják a HCOONa bomlását. A reakcióban képződő hidrogéngáz keletkezését gázvolumetriásan követjük, a formiát meghatározását pedig modern HPLC-n végezzük. A hallgató feladata a hangyasav, nátrium-formiát, és glükóz bontások tanulmányozása.

Reakciók oldószermentes körülmények között (kémia/vegyéssz mérnök Bsc, 2 fő, nincs szabad hely)

Napjainkban a fenntartható fejlődés érdekében arra törekszünk, hogy kémiai folyamataink zöldebbek legyenek. Egyik megoldás az lehet, ha átalakításaink során az alkalmazott mérgező,

gyúlékony és legtöbbször drága szerves oldószereket ún. zöld oldószerekre cseréljük, vagy akár elhagyjuk azokat. A hallgató feladata a PTA (PTA: 1,3,5-triaza-7- foszfaadamantán) és származékai előállításának megisméltése oldószer távollétében. Célul tűzzük ki továbbá, hogy P-, és N-donor atomokat tartalmazó ligandumokkal átmenetifém komplexeket állítsunk elő, hagyományos oldószeres körülmények között vagy őrléssel golyósmalomban. A komplexeket katalizátorként kívánjuk használni vizes-szerves kétfázisú reakciókban (pl. allil-alkoholok redox izomerizációjában, nitrilek hidratálásában és telítetlen vegyületek redukációjában). Kutatócsoportunkban a szilárd fázisú reakciók kivitelezéséhez rendelkezésre áll egy vibrációs és egy Retsch PM100 bolygóműves golyósmalom. A vegyületek azonosítására multinukleáris NMR, ESI-MS, IR és UV-látható spektroszkópiát és gázkromatográfiát alkalmazunk.

Szilárd fázisú reakciók irodalmi feldolgozása (kémia/vegyészmérnök Bsc, 2 fő, 1 szabad hely)

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

Vízoldható foszfinok és átmenetifém-komplexeinek (Ag, Au, Ru, Rh) irodalmi feldolgozása (kémia/vegyészmérnök Bsc, 2 fő, 1 szabad hely)

A hallgató feladata különböző manapság népszerű vízoldható foszfin (molekulaszerkezet, katalitikus tulajdonságok stb.) irodalmi feldolgozása.