

## Fizikai Kémiai Tanszék által meghirdetett témák 2019/2020/2. félév

### **Bányai István, Nyul Dávid:**

***Egyoldalú NMR relaxometriás (NMR-MoUSE) vizsgálatok kolloidok és gélek körében*** (vegyésszámológ vagy kémia BSc, vegyész vagy vegyésszámológ MSc)

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

a./ *Emberi bőrfelületek „in vivo” vizsgálata NMR-MoUSE technikával* (1 fő, nincs szabad hely)

b./ *Az NMR MoUSE mérési paramétereinek optimalása.* (1 fő, nincs szabad hely)

### **Bényei Attila:**

***Átmenetifém komplexek szerkezetének vizsgálata egykristály röntgendiffrakcióval*** (vegyész vagy vegyésszámológ MSc, kémia vagy vegyésszámológ 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 vagy vegyésszámológ MSc, kémia vagy vegyésszámológ BSc, 1 fő, nincs 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.

***Szerkezet meghatározása pordiffrakciós adatokból*** (vegyész vagy vegyésszámológ MSc, kémia vagy vegyésszámológ BSc, 1 fő, 1 szabad hely)

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, molekulacsaldok összehasonlítása*** (vegyész vagy vegyésszámológ MSc, kémia vagy vegyésszámológ BSc, 1 fő, nincs szabad hely)

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

***PETN-reduktáz homológiai röntgendiffrakciós szerkezeteinek összehasonlító elemzése*** (vegyész vagy vegyészmérnök MSc, kémia vagy vegyészmérnök 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)

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.

**Garda Zoltán:**

***Nyíltláncú és makrociklusos ligandumok Mn(II)-ionnal képződő komplexeinek egyensúlyi, <sup>1</sup>H-relaxometriás és kinetikai jellemzése*** (vegyészmérnök vagy kémia BSc, 2 fő, 2 szabad hely)

**Gombos Réka:**

***Pd(II)-szulfoszalán komplex alkalmazása lipidvegyületek hidrogénezésében*** (vegyészmérnök BSc, 1 fő, nincs szabad hely)

**Kálmán Ferenc, Botár Richárd:**

***Gd(III)-alapú, makrociklusos Ca(II)-szenzitív kontrasztanyag egyensúlyi és kinetikai vizsgálata*** (vegyészmérnök BSc, 2 fő, nincs szabad hely)

**Kéri Mónika, Miklósi Tamás, Csontos Máté:**

*NMR-relaxometriás mérések szilárd és folyadékfázisban* (vegyéssz mérnök vagy kémia BSc, vegyész vagy vegyéssz mérnök MSc)

Az NMR relaxometria hatékony módszer pórusos anyagok nedvességtartalmának mennyiségi és minőségi vizsgálatára, a nedvesítés mechanizmusára és pórusméret eloszlás meghatározására.

- a. *Polimer aerogélek és xerogélek vizsgálata NMR relaxometriás technikákkal.* (1 fő, nincs szabad hely)
- b. *Környezeti kémiai problémák megoldásai NMR relaxometriás módszerrel* (2 fő, nincs szabad hely)
- c. *Makromolekulás fémkomplexek NMR relaxometriás vizsgálata* (2 fő, nincs szabad hely)

**Kiss Virág:**

*Fehérjék szerkezetének relaxációs vizsgálata vizes közegben* (vegyész MSc, 1 fő, nincs szabad hely)

*Többgenerációs dendrimerek szerkezeti és fémkomplexeinek relaxációs vizsgálata* (vegyéssz mérnök MSc, 1 fő, nincs szabad hely)

**Kovács Eszter Mária:**

*La/Lu és Y/La keverék szorpciós/desorpciós vizsgálata Ca-bentoniton* (vegyéssz mérnök vagy kémia BSc, 1 fő, 1 szabad hely)

**Kónya József, Buzetzký Dóra:**

*Foszfát határfelületi reakciói talajkolloidokon* (vegyész MSc, 1 fő, nincs szabad hely)

Heterogén izotópcserével kísérletekkel vizsgáljuk, hogy a talajra juttatott foszforműtrágya milyen hányada elérhető a növények számára. Meghatározzuk, milyen a foszfortranszport sebessége steady-state állapotban a talaj és a talajoldat között. A radioaktív nyomjelzős módszer egyedülálló lehetőség ezeknek a növény táplálás, műtrágya-hasznosítás szempontjából fontos jellemzőknek a meghatározására.

### **Nagy Noémi, Buzetzky Dóra, Kovács Eszter Mária:**

***Radioaktív anionok megkötése módosított agyagkőzeteken/kettős hidroxidokon*** (vegyész vagy vegyészmérnök MSc, kémia vagy vegyészmérnök BSc, 1 fő, 1 szabad hely)

A nukleáris hulladék föld alatti tárolása során fontos szempont a radioanuklidok és a földtani környezet (kőzetek, talajok) közötti kölcsönhatások ismerete. A földtani képződmények felületi töltése jellemzően negatív, ezért a kationos jellegű radionuklidok megkötése jellemző. Lehetséges azonban az agyagkőzeteket kémiai úton módosítani, hogy azok a radioaktív anionokat is megkötse. A munka során ezeket a módosítási lehetőségeket, illetve anionos jellegű radionuklidok megkötését vizsgáljuk.

### **Novák Levente:**

***Amid kötés kialakítása termikus reakcióval poláris aprotikus közegben*** (vegyész vagy vegyészmérnök MSc, 1 fő, 1 szabad hely)

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 szolváló képessége tolja el a képződés irányába. Tervezzük a reakció kinetikai vizsgálatát kismolekulákkal, valamint polimerekkel, különös tekintettel az aprotikus oldószerben fellépő sav-bázis viszonyokra.

***Vizes fázisú méretkizárásos folyadékkromatográfia*** (kémia vagy vegyészmérnök BSc, vegyész vagy vegyészmérnök MSc, 2 fő, nincs szabad hely)

A szokványos HPLC technikákkal szemben a méretkizárásos folyadékkromatográfia (SEC) nem felületi megoszláson alapuló módszer, hanem az analizálandó minta komponensei által a porózus álló fázisban bejárt térfogat alapján választja el a komponenseket. A SEC nagyon fontos eszköz polimerek szintézise és módosítása során a molekulák hidrodinamikai sugarának és ebből származtatva molekulatömegének és molekulatömeg-eloszlásának meghatározására, valamint a tisztítási folyamat követésére. Az általunk használt vizes közegű SEC a szerves oldószer fázisú elválasztásokhoz viszonyítva több technikai nehézséget hordoz, mert poláris oldatokban előtérbe kerülnek azok a zavaró minta-mátrix kölcsönhatások (pl. ionos vagy hidrogénkötés), amelyek apoláris közegben sokkal kisebb jelentőségűek. Munkánk során különböző makromolekulák, funkcionális polimerek és oligomerek kromatográfiás elválasztását fogjuk optimalizálni, továbbá tervezzük méretkalibrációs sztenderdek is használható olcsón megvásárolható vagy előállítható vegyületek jellemzését.

**Novák Levente, Bányai István, Kéri Mónika:**

***Kolloidméretű ligandumok szintézise és szerkezeti vizsgálata*** (kémia vagy vegyészmérnök BSc, vegyész vagy vegyészmérnök MSc)

A makromolekulák sokféle funkciós csoporttal „dekorálhatók”, amelyek lehetővé teszik makromolekulás fémkomplexek, egyensúlyi, kinetikai és szerkezeti vizsgálatát, új fémkomplexek előállítását. Ennek elsősorban gyógyászati és környezetkémiai jelentősége lehet.

a./ *Makromolekulás ligandumok szintézise és jellemzése nagyfelbontású NMR módszerekkel* (1 fő, nincs szabad hely)

b./ *Makromolekulák moláris tömegének reometriás meghatározása (módszerfejlesztés)* (1 fő, nincs szabad hely)

c./ *Kolloidok és makromolekulák jellemzése ozmométeres technikákkal.* (1 fő, 1 szabad hely)

d./ *Tenzidek vizsgálata kis és nagyterű NMR módszerekkel.* (1 fő, nincs szabad hely)

**Purgel Mihály:**

***Átmenetifém-komplexek szerkezeti vizsgálata kvantumkémiai módszerekkel*** (kémia vagy vegyészmérnök BSc, 2 fő, 1 szabad hely)

Átmenetifém-komplexek szerkezeti paramétereinek meghatározása kvantumkémiai számításokkal, a lehetséges izomerek felderítése, azok egymásba alakulásának, illetve a hidrid-komplexek kialakulásának mechanizmus-vizsgálata figyelembe véve az oldószerhatást.

***Nehézfém-komplexek szerkezeti vizsgálata kvantumkémiai módszerekkel*** (kémia vagy vegyészmérnök BSc, 2 fő, 1 szabad hely)

Ruténium-, ródium-, palládium- és irídium-komplexek szerkezeti paramétereinek meghatározása kvantumkémiai számításokkal, a lehetséges izomerek felderítése, azok egymásba alakulásának, illetve a hidrid-komplexek kialakulásának mechanizmus-vizsgálata figyelembe véve az oldószerhatást.

***Szalán típusú komplexek szerkezeti paramétereinek meghatározása kvantumkémiai számításokkal*** (kémia vagy vegyészmérnök BSc, 2 fő, 2 szabad hely)

Szalán komplexek lehetséges izomerek felderítése, azok egymásba alakulásának mechanizmus-vizsgálata figyelembe véve az oldószerhatást.

**Tircsó Gyula:**

***Mn<sup>2+</sup>-alapú MRI kontrasztanyag-jelöltek előállítása és jellemezése*** (vegyészmérnök vagy kémia BSc, 1 fő, 1 szabad hely)

**Tircsó Gyula, Csupász Tibor:**

*Makrociklusos bifunkciós ligandumok előállítása diagnosztikai értékű fémionok komplexálására* (vegyésszámérnök vagy kémia BSc, vegyész MSc, 1 fő, nincs szabad hely)

**Tóth Imre, Csupász Tibor:**

*(CN)<sub>5</sub>PtTl komplex kölcsönhatása kis szerves molekulákkal* (vegyésszámérnök vagy kémia BSc, vegyész MSc, 1 fő, nincs szabad hely)

A direkt fém-fém kötést tartalmazó (CN)<sub>5</sub>PtTl kiindulási anyagból inert, lehetőleg tetraéderes Tl(III) centrumot tartalmazó adduktum előállítása és egyensúlyi, szerkezeti vizsgálata a feladat.

*Fluorid-kötő fémkomplexek vizsgálata* (vegyésszámérnök vagy kémia BSc, vegyész MSc, 1 fő, 1 szabad hely)

Al(III)-szerves ligandum (L) rendszerek AILF vegyeskomplekként képesek fluoridiont megkötni. Az AILF és hasonló (pl. Sb-tartalmú) vegyeskomplexek egyensúlyi, szerkezeti és kinetikai jellemzése a feladat.

**Tóth Imre, Kálmán Ferenc**

*Jodid-kötő fémkomplexek vizsgálata* (vegyésszámérnök vagy kémia BSc, vegyész MSc, 1 fő, 1 szabad hely)

Tl(III)-szerves ligandum (L) rendszerek TILI vegyeskomplekként képesek jodidiont megkötni. Az TILI vegyeskomplexek egyensúlyi, szerkezeti és kinetikai jellemzése a feladat.

**Tóth-Molnár Enikő:**

*A Mn<sup>2+</sup>-ion makrociklusos ligandumokkal alkotott komplexeinek koordinációs kémiai jellemzése* (vegyésszámérnök vagy kémia BSc, 1 fő, 1 szabad hely)

**Tóth-Molnár Enikő, Garda Zoltán:**

*A Mn<sup>2+</sup>-ion fluortartalmú ligandumokkal alkotott komplexeinek koordinációs kémiai jellemzése* (vegyésszámérnök vagy kémia BSc, 1 fő, 1 szabad hely)

### **Udvardy Antal:**

***Ru-PTA (PTA = foszfaurotropin) komplexek alkalmazása a formiátbontásban*** (kémia vagy vegyészmérnök 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 hallgató feladata a hangyasav, nátrium-formiát, és glükóz bontások tanulmányozása.

### **Udvardy Antal, Szolnoki Csenge Tamara**

***Reakciók oldószermentes körülmények között*** (kémia vagy vegyészmérnök BSc, 1 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 megismétlése 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.