

Fizikai Kémiai Tanszék záródolgozati témák 2021/22/2. félév

Bényei Attila:

Átmenetifém komplexek szerkezetének vizsgálata egykristály röntgendiffrakcióval (vegyész/vegyésmérnök MSc, kémia/vegyésmérnök 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/vegyésmérnök MSc, kémia/vegyésmérnök 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/vegyésmérnök MSc, kémia/vegyésmérnök 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/vegyésmérnök MSc, kémia/vegyésmérnök BSc, 1 fő, 1 szabad hely)

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

Buzetzký Dóra Beáta és Kovács Eszter Mária

Réteges kettős hidroxid (LDH)-tartalmú bentonit hibrid anyag szorpciós tulajdonságainak vizsgálata (vegyész/vegyésmérnök BSc, MSc, 2 fő szabad)

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.

Y/La - bentonit keverék szorpciós/deszorpciós vizsgálata (vegyésmérnök vagy kémia BSc., MSc. 1 fő szabad)

Czégéni Csilla:

Vízoldható átmenetifém komplexek előállítása és katalitikus tulajdonságainak vizsgálata vizes közegű homogénkatalitikus hidrogéntárolásban (Vegyészmérnök BSc, 2 fő, nincs szabad hely)

Vízoldható kelátképző PNP ill. PCP típusú ligandumok és átmenetifém (Rh, Ru, Mn) komplexeik előállítása. Az előállított komplexek szerkezetének felderítése spektroszkópai módszerekkel és katalitikus tulajdonságainak vizsgálata vizes közegű homogénkatalitikus hidrogéntárolásban, hangyasav és formiátok bontásában.

Hollóczki Oldamur:

Sustainable chemistry through theoretical calculations (chemistry BSc, 1 person, not free)
The applicant will have to perform DFT and ab initio calculations to explore the reaction mechanism of the synthesis of imidazolium dithiocarboxylate zwitterionic structures, to explain recent experimental findings published in literature.

Kéri Mónika:

Környezeti porózus adszorbensek szerkezetének NMR vizsgálata (kémia BSc, 2 fő, 1 szabad hely)

A természetes vizekben, talajokban előforduló környezetszennyező anyagok eltávolítására megoldást jelenthet azok megkötése porózus 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 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/vegyészmérnök MSc. 1 fő, nincs szabad hely)

A hallgató feladata rezorcín-aceton kopolimerek előállítása és keresztkötése oldat fázisban. Szuperkritikus szárítás után a keletkezett polimer aerogélek pórusos struktúráját 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.

Kéri Mónika, Papp Vanda:

Biodegradábilis keresztkötött polimerek szerkezetének vizsgálata (kémia BSc, 1 fő, nincs szabad hely)

Olyan poliuretán alapú polimereket vizsgálunk, amelyek DMSO-ban jól duzzadnak. A duzzadás során felvett oldószer folyadék fázisú NMR spektroszkópiával jól detektálható, T_2 relaxációja a duzzadás folyamatáról, a szerkezet változásáról ad információt, mely összefüggésben áll a keresztkötések számával. Az oldószer mozgása a keresztláncok között, és a keresztkötések között kitöltött térrészek méretének meghatározása további információval szolgálhat a keresztkötés-számról.

M. Nagy Noémi és Kovács Eszter Mária:

Diffúziós és adszorpciós vizsgálatok agyag-kettőshidroxid mintákban radioizotópos nyomjelzéssel (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, míg a réteges kettőshidroxidokon az anionok kötődnek meg. Ezért olyan összeállítás próbálunk ki, ahol ezt a két anyagot szendvics szerkezetben állítjuk fel a migrációs cellákban, és így vizsgáljuk a radioaktív izotópok migrációját.

Structural changes of lanthanide bentonites by heat treatment /Lantanoida-bentonitok szerkezeti változása hőkezelés hatására (Chemistry or Chemical engineer BSc./vegyésszámológ vagy kémia BSc., 1 free / 1 szabad hely)

M. Nagy Noémi, Buzetzký Dóra Beáta és Kovács Eszter Mária:

Preparation and structural analysis of Sn-bentonite for $^{99m}\text{TcO}_4^-$ sorption (Chemistry or Chemical engineer BSc., 2 students, no free place).

Pertechnetate anion sorption is going to be investigated with Sn(II)- TcO_4^- redox reaction. It is assumed that tin ion with a reducing effect is capable to sorb $^{99m}\text{Tc(VII)}$ ions in the form of TcO_2 . This experiences would be interpreted focusing on the pH and redox potential values that determine the chemistry forms, and on thermodynamic data.

Miklósi Tamás Sándor, Bányai István:

Karboximetilezett-polietilén-iminek Zn(II)-komplexeinek NMR vizsgálata (Msc diplomamunka, 1 fő, nincs szabad hely)

A vizsgált karboximetilezett polietilén-imin donorcsoportjai (amino- és karboxi csoportok) miatt sok átmenetifém ionjával stabil komplexet képez.

Korábban többféle fémionnal vizsgáltuk komplexképzési tulajdonságait, a cinkkel való komplexképződésének vizsgálatának potenciális gyakorlati alkalmazása a makromolekula a Zn(II)-ionok ipari vagy bányászati hulladékvizekből való eltávolítása. Ezért célunk a komplexképződési folyamat vizsgálata a pH-függvényében ^1H NMR-rel, és a komplexképződés folyamatainak jellemzése a cél.

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 betöltve, 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 funkcionizált 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).

Makromolekulás és kolloid rendszerek reológiai vizsgálata (BSc szakdolgozat, 1 fő)

A folyékony anyagok ellenállása a folyást előidéző erőhatásokkal szemben a rendszer belső struktúrájának, valamint oldatok esetén az oldott anyag és az oldószer közötti kölcsönhatások függvénye. Egy rendszer nyírás- és hőmérsékletfüggő reológiai viselkedésének követése révén információt nyerhetünk a részecskék között fellépő kölcsönhatások jellegéről és mértékéről, valamint az esetleges szerkezet felbomlásáról és újjáépüléséről. A reometriás vizsgálatokat méret- és koncentráció meghatározásra alkalmas (pl. NMR, DLS) módszerekkel kombinálva a diffúziós együtthatókból kiszámított hidrodinamikai molekula- vagy részecskeátmérők a viszkozitás hatásával korrigálhatók, ezen felül mikroheterogén rendszerekben lehetővé válik az egyedi komponensek fázisok közötti megoszlásának meghatározása.

„Ritka(föld)fém kutatócsoport”

A 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 fémjei) koordinációs kémiájával foglalkozik. A fémionok nyíltláncú és makrociklusos poliaza–polikarboxilát, –polifoszfónát, –polifoszfinát 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.

Garda Zoltán:

^{19}F tartalmú nyíltláncú és makrociklusos ligandumok Mn(II) és Fe(III)-ionokkal képződő komplexek egyensúlyi, ^1H - és ^{19}F -relaxometriás és kinetikai jellemzése. (kémia vagy vegyészmérnök BSc, 1 fő)

Vegyészmérnök BSc, kémia BSc hallgatók számára (2-3 fő):

Dr. Tircsó Gyula

Makrociklusos ligandumok előállítása átmenetifémionok komplexálása céljával.

Dr. Tircsó Gyula és Csupász Tibor

Kelátrok előállítása diagnosztikai és terápiás fémizotópok komplexálására

Dr. Tircsó Gyula és Madarasi Enikő

Mn(II)-komplexek előállítása, egyensúlyi és kinetikai jellemzése.

Kémia MSc, esetleg gyógyszerész hallgató számára (1 fő):

Dr. Tircsó Gyula és Váradi Balázs

Intelligens MRI kontrasztanyagok előállítása és kémiai jellemzése