

Fizikai Kémiai Tanszék záródolgozati témák 2022/23/1. félév

Bányai István:

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

Bényei 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)

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.

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 spektroszkópiai módszerekkel és katalitikus tulajdonságainak vizsgálata vizes közegű homogénkatalitikus hidrogéntárolásban, hangyasav és formiátok bontásában.

Hollóczki Oldamur:

Imidazólium sók és széndiszulfid reakciójának mechanisztikus vizsgálata (kémia BSc, 1 fő, nincs szabad hely)

Horváth Henrietta, Marozsán Natália

Vízoldható Ir(I)-kARBÉN-foszfin komplexek előállítása és katalitikus tulajdonságainak vizsgálata (Vegyészmérnök BSc szakdolgozat, 2 fő, nincs szabad hely)

Vízoldható 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:

Cu(II) megkötésére alkalmas biciklusos komplexképző ligandum előállítása és komplexének koordinációs kémiai vizsgálata. (kémia és vegyészmérnök BSc, nincs szabad hely)

Kéri Mónika:

Környezeti porózus adszorbensek szerkezetének NMR vizsgálata (kémia BSc, 1 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 pórus szerkezetének, szerves szennyezőkkel való felületi reakcióknak leírása. A cél tehát a porózus anyagok

folyékony közeggel való kölcsönhatásának átfogó jellemzése olyan mágneses magrezonanciás módszerek alkalmazásával, mint az NMR krioporozimetria, relaxometria és diffúziometria.

Kéri Mónika, Nyul Dávid:

Rezorcín-formaldehid aerogélek előállítása és módosítása grafén-oxiddal (vegyészmérnök MSc. 1 fő, nincs szabad hely)

A hallgató feladata rezorcín-formaldehid aerogél – grafén-oxid kompozitok előállítása. A keletkezett 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). A grafén-oxid komponenszt funkcionálizálva növeljük az adszorbens fémmegkötő képességét és teszteljük különböző rendszereken.

Kéri Mónika, Papp Vanda:

Víz mobilitásának NMR spektroszkópiás vizsgálata cement alapú kötőanyagokban és kőzetekben (kémia BSc, 1 fő, vegyész MSc, 1 fő, nincs szabad hely)

A kis- és közepes aktivitású radioaktív hulladékokat az elhelyezést megelőzően kezelni szükséges. Ennek egy fontos lépése a kondicionálás, mely során egy szilárd, cementalapú mátrixban immobilizálják a folyékony hulladékot. A hosszútávú tárolás és a szennyezésmegelőzés céljából kiemelten fontos, hogy a cement mátrix porozitása és a benne kötött folyadék mobilitása megfelelően minimális legyen. A hulladéklerakó kőzetanyagával szemben is hasonló elvárások vannak. A porózus anyagok és azok közeggel való kölcsönhatása átfogóan jellemezhető kis- és nagyterű mágneses magrezonanciás módszerek alkalmazásával, mint az NMR relaxometria, diffúziometria és krioporozimetria. A hallgató munkájának célja különböző cement mátrixok, geopolimerek, kőzetminták porozitásának meghatározása, a pórusokban kötött és mozgó folyadék mobilitásának, diffúziójának vizsgálata az említett módszerekkel.

Kovács Eszter Mária:

Y/La - bentonit keverék szorpció/deszorpció vizsgálata (vegyészmérnök vagy kémia BSc., MSc. 1 fő szabad)

M. Nagy Noémi és Kovács Eszter Mária:

Réteges kettős hidroxid (LDH)-tartalmú bentonit hibrid anyag szorpció tulajdonságainak vizsgálata (vegyész/vegyészmérnök 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.

Lantanoida-bentonitok szerkezeti változása hőkezelés hatására (Vegyészmérnök vagy kémia BSc., 1 fő szabad)

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.

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

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.

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

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 „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 nyíltlancú és makrociklusos poliaza–polikarboxilát, –polifoszfónát, –polifoszfínát 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 , ^{13}C , ^{17}O és ^{31}P) egy, ill. többdimenziós és TD, ill. HPLC-s (analitikai és preparatív) módszerekre alapozunk.

Garda Zoltán:

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

Vegyészmérnök BSc, kémia BSc hallgatók számára (1-1 fő):

Dr. Tircsó Gyula

Makrociklusos ligandumok előállítása átmenetifémionok komplexálása céljával.

Dr. Tircsó Gyula és Csupász Tibor

Új kelátorok előállítása diagnosztikai és terápiás fémizotópok komplexálására

Dr. Tircsó Gyula és Kapus István

8-oxikinolinát oldalláncot tartalmazó ligandumok Mn(II)-komplexei: előállítás és kémiai jellemzés.

Kémia MSc, esetleg gyógyszerészhallgató számára (1 fő):

Dr. Tircsó Gyula és Váradi Balázs

Intelligens MRI kontrasztanyagok előállítása és kémiai jellemzése

Udvardy Antal, Szolnoki Csenge Tamara:

Ru(II)-foszfa-urotropin komplexek a hidrogéntárolásban (kémia/vegyészmérnök Bsc,)

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 formiát meghatározását pedig modern HPLC-n végezzük. A hallgató feladata a hangyasav, nátrium-formiát, és glükóz bontások tanulmányozása.

Reakciók oldószermentes körülmények között (kémia/vegyészmérnök Bsc,)

Napjainkban a fenntartható fejlődés érdekében arra törekszünk, hogy kémiai folyamataink zöldőbbek 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,)

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,)

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