

Fizikai Kémiai Tanszék záródolgozati témák 2022/23/2. félév

Bényei Attila:

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

Czégény Csilla:

Vízoldható ligandumok és fémkomplexek előállítása, szerkezetvizsgálata katalitikus tulajdonságainak vizsgálata hidrogén tárolására alkalmas katalitikus rendszerekben (kémia és vegyésmérnök BSc, 1 fő)

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

Kálmán Ferenc:

Cu(II) megkötésére alkalmas biciklusos komplexképző ligandum előállítása és komplexének koordinációs kémiai vizsgálata. (kémia és vegyésmérnök BSc)

Karban merevített komplexképzők szintézise és fémkomplexeik koordinációs kémiai jellemzése (kémia és vegyésmérnök BSc)

Kéri Mónika:

Környezeti porózus adszorbensek szerkezetének NMR vizsgálata (kémia/vegyészmérnök BSc, 1 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.

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.

Papp Gábor:

Nem-nemesfém tartalmú átmenetifém komplexek előállítása és alkalmazása vizes közegű hidrogéntárolásban és/vagy szén-dioxid hidrogénezésben (3-4 fő, vegyész/vegyészmérnök Bsc/Msc)

„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–poli-karboxilát, –foszfonát, –foszfinát, pikolinát, amidát valamint újabban 8-oxikolinát

komplexeit állítjuk elő, vizsgáljuk ezek fizikai-kémiai sajátságait (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 (^1H , ^{13}C , ^{17}O és ^{31}P), ill. HPLC-s (analitikai és preparatív) módszerekre alapozunk.

Vegyésszámárnök BSc, kémia BSc és Vegyész MSc, esetleg gyógyszerész hallgatók számára (3+1 fő):

Kapus István és Dr. Tircsó Gyula (1 fő)

Makrociklusos ligandumok előállítása átmenetifémionok komplexálása céljával.

Váradi Balázs és Dr. Tircsó Gyula (1 fő)

Intelligens/okos kontrasztanyag-jelöltek előállítása és jellemzése.

Csupász Tibor és Dr. Tircsó Gyula (1 fő – van rá jelentkező)

Angiográfiás képalkotásban alkalmazható makrociklusos Mn(II)-komplexek előállítása és jellemzése.

Csupász Tibor és Dr. Tircsó Gyula (1 fő)

Nem szokványos oldalláncokat tartalmazó makrociklusos komplexképzők előállítása és fémkomplexeinek koordinációs kémiai jellemzése.

Tóth Imre emeritus professzor:

(CN)5PtI komplex reakciója kis szerves molekulákkal (BSc szakdolgozat, már betöltött hely)

A feladat a hasonló tárgyú kísérletek folytatása, elsősorban glifozát (N-(foszfometil)glicin) ligandummal, fotometriás és NMR mérések segítségével.

Udvardy Antal, Szolnoki Csenge Tamara:

Ru(II)-foszfa-urotropin komplexek a hidrogéntárolásban (kémia/vegyésszámárnök Bsc.)

Ru-PTA (PTA = foszfaurotropin) komplexek alkalmazása a formiátbontásban (kémia vagy vegyésszámárnök 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 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 redukciójában). 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.