

Fizikai Kémiai Tanszék záródolgozati témák 2020/21/1 félév

Bányai István, Csontos Máté:

Agyagásványok hidratációjának vizsgálata NMR relaxometriával(kémia/vegyészmérnök BSc, vegyész/vegyészmérnök MSc)

Az agyagásványok a legfontosabb talajalkotók, szerepük a talajok minőségének meghatározója. Bennük a vízmolekulák és az ionok mozgása kulcskérdés és nagy energiákkal kutatják. Az alkálifémen NMR relaxometria és a kisterű proton NMR relaxometria hasznos adalékokkal szolgálhat az egyéb módszerekkel nyert adatokhoz.

a/ A vízmolekulák protonjainak relaxációjára bentonitokban (1 fő, nincs szabad hely)

b/ Na⁺-ionok relaxációs sebessége bentonitokban (1 fő, 1 szabad hely)

Bányai István, Kiss Virág:

Szilikon hidrogélek roncsolásmentes vizsgálata NMR MoUSE technikával (kémia/vegyészmérnök BSc, 1 fő, 1 szabad hely)

Szilikon hidrogélek a mindennapi életben széles körben használtak, mint képernyőfóliák, kontaktlencsék vagy akár kozmetikai tapaszok. A szakdolgozat során a hallgató megismerheti az NMR MoUSE elvi alapjait, méréseket végezve a transzverzális, longitudinális relaxációs időket megállapítva. Az NMR MoUSE, azaz Mobile Universal Surface Explorer egy roncsolásmentes kisterű NMR készülék, melynek segítségével nem csak a relaxáció, hanem a kémiai csere mellett a diffúzió is követhető. A szakdolgozó az eltérő gyártóktól származó szilikon hidrogélek nedvesítését NMR MoUSE mérésekkel követné, elemezné a nedvesítés eredményeit. A számolásokhoz szükséges szoftverek (MatLab, UpenWin) megismerése után önállóan értékelné ki a mért eredményeket.

Bányai István, Kiss Virág, Novák Levente:

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

A hallgató a különféle fehérjemolekulák (BSA (marha szérumalbumin), HSA (humán szérumalbumin)) relaxációs tulajdonságait vizsgálná NMR MoUSE technikát alkalmazva.

Cél, hogy az oldatban a fehérjéhez kötött és a szabad vizek arányát megismerje, a relaxáció, kémiai csere mellett a diffúziót is leírja.

Többgenerációs dendrimerek szerkezeti és fémkomplexeinek relaxációs vizsgálata
(vegyész/vegyésszámológus MSc, 1 fő, nincs szabad hely)

A funkcionizált dendrimerek lehetséges gyógyszerhordozók vagy akár MRI kontrasztanyagok is lehetnek, ezért vizsgálatuk a mai kutatások élvonalába tartozik. A hallgató ötödik generációs PAMAM dendrimerek funkcionizálását végezné el. A már karboximetilezett/karboxietilezett és szerkezetileg megismert dendrimer komplexképző sajátosságait vizsgálná többféle fémionnal (Gd, Mn Cu) relaxációs módszert alkalmazva. A különféle dendrimereken található oldalláncok protonáltságának vizsgálatát a hallgató potenciometriás titrálásokkal követné.

Bányai István, Miklósi Tamás Sándor:

Kolloidméretű ligandumok szintézise és fémkomplexeik szerkezeti vizsgálata(kémia/vegyésszámológus BSc, vegyész/vegyésszámológus MSc)

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

a./ Makromolekulás ligandumok szintézise és komplexeik jellemzése nagyfelbontású NMR módszerekkel (2 fő, nincs szabad hely)

b/ NMR paracszt kontrasztanyagok tesztelésére alkalmas impulzusszekvencia kidolgozása és tesztelése (1 fő kémia/vegyésszámológus BSc, 1 szabad hely)

Bányai István, Nyul Dávid:

Alkálifém NMR relaxometria(vegyész/vegyésszámológus MSc)

Az alkálifémek sói mind biológiai folyadékokban, mint a kémiai kísérletekben alkalmazott oldatokban jelenlévő komponensek. Kölcsönhatásaikról vagy nem veszünk tudomást, vagy nincs róla tudomásunk. Különösen igaz ez a makromolekulás és a micelláris kolloidok oldataira. Az alkálifém ionok sokszoros (dupla, tripla) kvantumszűrt relaxációs sebességének mérése kvantitatív információt adhat ezeknek a kölcsönhatásoknak a leírására

a/ Makromolekulás kelátok kölcsönhatása Na⁺-ionokkal (1 fő, nincs szabad hely)

b/ Anionos micellák és ellenionjaik kölcsönhatásának vizsgálata NMR relaxációs módszerrel.

(1 fő, 1 szabad hely)

Egyoldalú NMR relaxometriás (NMR-MoUSE) vizsgálatok kolloidok és gélekkörében(kémia/vegyésszámológus BSc, vegyész/vegyésszámológus MSc)

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 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 optimalizálása. (1 fő, nincs szabad hely)

c/ Szén aerogélek NMR relaxometriás vizsgálata (1 fő, 1 szabad hely)

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 előállítás és szerkezet meghatározása pordiffrakciós adatokból (vegyész/ vegyészmérnök MSc, kémia/vegyészmérnök BSc, 1 fő, nincs 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, molekulacsaládok összehasonlítása(vegyész/vegyészmérnök MSc, kémia/vegyészmérnök BSc, 1 fő, nincs 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/vegyészmérnök MSc, kémia/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 fehérjekrisztallográfiai 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, no 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.

Buzetzký Dóra Beáta, Kovács Eszter Mária:

Réteges kettős hidroxid (LDH)-tartalmú bentonit hibrid anyag szorpciós és migrációs tulajdonságainak vizsgálata (kémia/vegyészmérnök BSc, vegyész/vegyészmérnök MSc, 2 fő, 2 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.

Buzetzky Dóra Beáta, Nagy Noémi:

Radioaktív anionok megkötése módosított agyagkőzeten(kémia/vegyészmérnök BSc, vegyész/vegyészmérnök MSc, 2 fő, 2 szabad hely)

A nukleáris hulladék föld alatti tárolása során fontos szempont a radionuklidok 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 kémiaiilag úgy módosítani, hogy azok a radioaktív anionokat is megkössék. A munka során ezeket a módosítási lehetőségeket, illetve anionos jellegű radionuklidok megkötését vizsgáljuk.

Garda Zoltán:

Nyíltláncú és makrociklusos ligandumok Mn(II)-ionnal képződő komplexeinek egyensúlyi, ¹H-relaxometriás és kinetikai jellemzése (kémia/vegyészmérnök BSc, 1 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, –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 , ^{19}F , ^{17}O , ^{19}F , ^{31}P , ^{23}Na , ^{45}Sc , ^{71}Ga , ^{115}In , ^{195}Pt , $^{203/205}\text{Tl}$ és a ^{209}Bi) egy, ill. többdimenziós és TD, ill. HPLC-s (analitikai és preparatív) módszerekre alapozunk.

Gombos Réka:

Lipidvegyületek és –keverékek hidrogénezése átmenetifém-komplexszel(kémia/vegyésszámológus BSc, 2 fő, nincs szabad hely)

Horváth Henrietta:

Fe-karbén komplexek előállítás és katalitikus alkalmazása(kémia BSc, 1 fő, nincs szabad hely)

Ir-Nitron komplexek előállítás és katalitikus alkalmazása (vegyésszámológus BSc, 1 fő, nincs szabad hely)

Kémiai hidrogéntárolás Ir-karbén komplexekkel (vegyésszámológus BSc, 1 fő, nincs szabad hely)

Kéri Mónika:

Agyagásványok hidratációjának vizsgálata NMR technikákkal(kémia BSc, 1 fő, 1 szabad hely)

A bentonitoknál a rétegek közötti térben található ellenion befolyásolhatja az agyagásvány szerkezetét, duzzadási, nedvesedési tulajdonságait. A különböző víztartalmú agyagásvány szuszpenziókban mérhető a víz protonjainak relaxációs ideje, diffúziós együtthatója, mely információt ad a bentonit határfelületi kölcsönhatásairól, duzzadásáról vizes közegben. A krioporozimetriás mérésekkel a réteges szerkezet változásáról kapunk információt a megfelelő mérési paraméterek kidolgozását követően.

Térhálós hidrogének NMR relaxometriás vizsgálata(vegyésszámológus MSc, 1 fő, nincs szabad hely)

Térhálós szerkezetű polimerekben a térhálósűrűség nem homogén, hanem bizonyos eloszlást mutat. A térháló szerkezeti elemei eltérő mobilitást mutatnak, például a keresztkötéseknél rigid a szerkezet, míg az elasztikus láncok mobilitása nagyobb. Vizes közegben a polimer hidrogélekben mérhető transzverzális relaxáció információt ad a protonok mobilitásáról, amely tehát összefüggésben áll a térháló homogenitásával, a keresztkötések számával stb. A mérések kisterű NMR készüléssel, illetve NMR MOUSE (Mobile Universal Surface Explorer) készüléssel történnek.

Kéri Mónika, Kalmár József:

Ca-alginát aerogél szerkezetvizsgálata NMR technikákkal(vegyész MSc, 1 fő, nincs szabad hely)

A különböző összetételű porózus aerogélek szerkezetének, folyékony közegben való viselkedésének leírása igen fontos ezen anyagok alkalmazhatósága szempontjából. A pórusméret eloszlásának és a pórusok alakjának meghatározása NMR krioporozimetriás módszerrel történik. A pórusok nedvesíthetőségének és a porózus szerkezet kialakulásának vizsgálata folyékony közegben kis terű NMR készüléssel, relaxometriás és diffúziometriás módszerrel lehetséges. Fontos a módszerek optimalizálása az adott porózus anyag jellemzéséhez.

Kiss Virág, Novák Levente:

Komplexbépző kismolekulák rögzítése polimereken (kémia/vegyészmérnök BSc, 1 fő, 1 szabad hely)

A szakdolgozat során a hallgató megismerné a szintézis lépéseit, mely során egy, akár MRI kontrasztanyagként is használt kis molekulát polimerhez (PEI) rögzítene. Szerkezetvizsgáló módszerrel (NMR) leírná a funkcionizált polimert. A komplexképző sajátságok vizsgálatához relaxometriát alkalmazna. A kapott relaxivitás értékeket összevetné a polimerhez nem kötött analógokkal.

Kovács Eszter Mária:

Réteges kettős hidroxid (LDH)-tartalmú bentonit hibrid anyag készítése és szerkezetvizsgálata (kémia/vegyészmérnök BSc, 1 fő, 1 szabad hely)

Réteges kettős hidroxid (LDH)- tartalmú bentonit hibrid anyag készítése, fejlesztése nagy tudományos és műszaki jelentőséggel bír. 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. Ezen oknál fogva a kutatás specifikus célja olyan anyag előállítását, ami az anionos és kationos radionuklidokat együtt képes megkötni nagy hatékonysággal.

Novák Levente:

Amid kötés kialakítása termikus reakcióval poláris aprotikus közegben
(vegyész/vegyésmérnök 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 aminból 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 (kémia/vegyésmérnök BSc, 2 fő, 2 szabad hely, vegyész/vegyésmérnök MSc, 1 fő, 1 szabad hely)

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.

Purgel Mihály:

Átmenetifém-komplexek szerkezeti vizsgálata kvantumkémiai módszerekkel(kémia/vegyészmérnök BSc, 2 fő, nincs 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/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 BSc projektmunka, 1 fő, 1 szabad hely)

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

Tircsó Gyula:

Makrociklusos ligandumok előállítása átmenetifémionok komplexálása céljával(kémia/vegyészmérnök BSc, 1 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, –polifoszfónát, –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 , ^{13}C , ^{17}O és ^{31}P) egy, ill. többdimenziós és TD, ill. HPLC-s (analitikai és preparatív) módszerekre alapozunk.

Mn(II)-komplexek előállítása, egyensúlyi és kinetikai jellemzése (kémia/vegyészmérnök BSc, 1 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, –polifoszfónát, –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 , ^{13}C , ^{17}O és ^{31}P) egy, ill. többdimenziós és TD, ill. HPLC-s (analitikai és preparatív) módszerekre alapozunk.

Tircsó Gyula, Csupász Tibor:

Makrociklusban oxigénatomot tartalmazó komplexképzők előállítása angiográfiás képalkotáshoz(vegyész MSc/gyógyszerész, 1 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, –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.

Udvardy Antal, Szolnoki Csenge Tamara:

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

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, Bunda Szilvia, Szolnoki Csenge Tamara:

Reakciók oldószermentes körülmények között (kémia/vegyészmérnök 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 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.

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

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

Vízoldható foszfinok irodalmi feldolgozása (kémia/vegyészmérnök Bsc, 2 fő, 2 szabad hely)

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