

DE-MTA HOMOGÉN KATALÍZIS ÉS REAKCIÓMECHANIZMUSOK KUTATÓCSOPORT

Dr. Czégéni Csilla Enikő tudományos segédmunkatárs:



Nitrilek hidratálása átmenetifém N-heterociklusos karbén komplexekkel (KBSc) A nitrilek hidratálása amidokká az egyik legfontosabb funkciós csoport átalakítási reakció ugyanis az amidok széleskörűen alkalmazott kiindulási anyagok a szerves szintézisekben valamint az iparban is. Az arany(I)-NHC komplexek közül a szulfonált IMes és SIMes komplexei katalitikusan hatékonyak bizonyultak acetilén származékok hidratálásában. Célunk ezen komplexek alkalmazása különböző nitrilek hidratálására, továbbá Rh(I)- és Ru(II)-NHC komplexek hidratálási tulajdonságának vizsgálata.

Szulfonált IMesHCl és SIMesHCl ródium(I)-komplexek katalitikus tulajdonságainak vizsgálata (VMBS) A vízoldható N-heterociklusos karbén átmenetifém ionokkal stabilis komplexeket alkotnak. A Rh(I)-NHC karbén komplexekre is jellemző, hogy a karbén ligandum mellett tartalmazhatnak még foszfin ligandumot is, ami nagyobb katalitikus aktivitást biztosíthat a komplexnek. Célunk vízoldható Rh(I)-katalizátorok előállítására és katalitikus tulajdonságainak felderítésére. - **Tóbiás Eszter**

Gombos Réka egyetemi tanársegéd:

Pd-szalán komplex alkalmazása modellmembránok hidrogénezési reakcióiban (KBSc) A sejtmembránok fluiditása hatással van a membránhoz kötött folyamatokra, mint pl. a transzport folyamatokra, az enzimaktivitások megváltozására, vagy a HSP (Heat Shock Protein) fehérjék termelődésére. A membrán fluiditását több tényező befolyásolja, ilyen pl. a hőmérséklet, vagy a membránban található lipidek telítettségi foka – minél több telített lipidet tartalmaz a membrán, annál „keményebb”. Ennek következménye, hogy a membránok lipidjeinek hidrogénezésével képesek vagyunk a membránok fluiditását befolyásolni. Célunk a Pd-szalán katalizátor alkalmazása modellvegyületek, és liposzóma mint modellmembrán hidrogénezési reakcióiban. - **Nagyházi Brigitta**

Gombos Réka egyetemi tanársegéd és **Dr. Karaffa Levente** egyetemi docens:

A Pseudomonas putida F1 baktérium sejtmembrán szerkezetének kémiai módosítása, és hatása a transzport folyamatokra (BMBSc) A Pseudomonas putida F1 baktérium képes a triklór-etilén lebontására a szennyvizekben, így ennek a szennyezőnek a mennyiségét határérték alá tudjuk csökkenteni. Célunk egy megbízható analitikai módszer kidolgozása a TCE meghatározására, a Pseudomonas putida F1 baktérium, az ebből előállított protoplaszt és a hidrogénezett baktérium TCE lebontó képességének vizsgálata. - **Nagy Alexandra**

Dr. Horváth Henrietta tudományos munkatárs:

Ru- és Ir-komplexek előállítása és alkalmazása környezeti szennyezők felszámolására (KBSc) - **Forgács Viktória**

A Fizikai Kémiai Tanszéken meghirdetett TDK-, projekt-, szakdolgozati és diplomamunka-témák

Dr. Joó Ferenc egyetemi tanár és **Voronova Krisztina** tudományos segédmunkatárs:

Új Pd-szalán katalizátorok alkalmazása vizes közegű Suzuki-kapcsolásban (KBSc) -
Bunda Szilvia

Új, vízdoldható Pd-katalizátorok alkalmazása Sonogashira- és Heck-kapcsolásban (KBSc)
- **Homolya Levente**

Dr. Kathó Ágnes tudományos főmunkatárs:

Vízdoldható Pt-fém komplexek hidrogénező és hidrodehalogénező tulajdonságainak
vizsgálata kétfázisú rendszerekben (KT, KBSc, VMBS, KMS) - **Tiba Sándor**

Dr. Kathó Ágnes tudományos főmunkatárs és **Udvardy Antal** tudományos segédmunkatárs:

Acetilének, nitrilek hidratálása vízdoldható Pt-fémkomplexekkel (KBSc, VMBS, KMS) -
Szolnoki Csenge

Vízdoldható foszfinok, karbének Pt-fémekkel képzett komplexeinek szilárd fázishoz való
rögzítése és azok katalitikus alkalmazása (VM, T, KBSc, VMBS) - **Varga Gáspár Miklós**

1,3,5-triaza-7-foszfadamantán származékok és fémkomplexeinek előállítás (VM, T,
KBSc, VMBS, KMS) - **Szarvas Tímea**

Dr. Purgel Mihály tudományos munkatárs:



Ruténium(II)-komplexek izomériájának vizsgálata kvantumkémiai számításokkal
(KBSc) Vízdoldható ruténium(II)-komplexek izomereinek tanulmányozása különböző
kvantumkémiai módszerekkel. A hidrogénnyomás, illetve a közeg kémhatása jelentős
mértékben befolyásolja a cisz-transz izomériát. Ezen izomerek relatív energiáinak összevetése,
valamint azok kialakulásának tanulmányozása a cél.

Fém-komplexek intramolekuláris átrendeződésének kvantumkémiai vizsgálata (KBSc)
Elsősorban lantanoida(III)-, illetve a III. főcsoportoz tartozó M(III)-komplexek (M = Al, Ga,
Tl) izomereinek egymásba alakulásának tanulmányozása, azok mechanizmus-felderítése a cél
kvantumkémiai módszerekkel. - **Sáfár Zoltán**



**Ruténium(II)-komplexek katalitikus aktivitásának vizsgálata kvantumkémiai
számításokkal** (KMS) Különböző szubsztrátumok hidrogénezési és hidrodehalogénezési
folyamatainak vizsgálata kvantumkémiai módszerekkel. A cél a kísérleti úton meg nem
határozható intermedierek és átmeneti állapotok azonosítása, a mechanizmus felderítése.

**Kvantumkémiai számítások a Pd(QS)₂ aktív formájának kialakulására és szerepére
katalitikus folyamatokban** (KMS) A Pd(QS)₂ számos hidrogénezési és hidrodehalogénezési
folyamatban játszott szerepet mint hatékony katalizátor, ám a mechanizmusok javarészt nem
(teljes egészében) ismertek. Emellett a katalitikusan aktív forma kialakulásának
mechanizmusa, valamint szerkezete sem ismert. Mindezek felderítésére nyújtanak lehetőséget
a kvantumkémiai számítások. - **Fehér Péter**

FOTOKÉMIAI KUTATÓCSOPORT

Dr. Gáspár Vilmos tanszékvezető egyetemi tanár és **Dr. Ósz Katalin** egyetemi docens:

Klórfeholok fotokémiai klórmentesítése (KBSc, VMBSc) Korábbi vizsgálataink szerint a 2,4,6-triklórfenol (TCP), habár sötétben hosszú ideig tárolhatóak, oldatként UV-fényre érzékeny vegyületek, melynek bomlása során halogenidion szabadul fel. Célunk ezen fotoreakció részletes kinetikai vizsgálata, a mechanizmus és kvantumhasznosítási tényező meghatározása, a termékek azonosítása, valamint hasonló fotoreakciók tanulmányozása további mono-, di- és triklórfenol származékok esetén. A mérések során fotoreaktorként egy diódasoros spektrofotométert alkalmazunk. - **Markó Boglárka**

Klórfeholok redukív klórmentesítése N,N,N',N'-tetrametil-benzidin típusú fotoérzékenyítő szerek segítségével (KBSc, VMBSc) Az irodalomból klórtartalmú növényvédőszerrek redukív klórmentesítésére ismert módszer a tetrametil-benzidin típusú fotoérzékenyítők használata nátrium-szulfít redukálószerrel együtt. Az eredeti módszert alkohol és víz elegyében írták le, de valószínűleg lehetőség lenne tisztán vizes közeg használatára is, ha valamilyen egyéb hidrogéndonort találnánk az alkohol helyett. Cél az ismertetett alapokon működő klóreltávolítási módszer kidolgozása klórfeholokra, vizes közegben. Ennek tesztje néhány különböző klórfeholal, az eljárás körülményeinek optimalizálása részletes mechanizmusvizsgálatok után. - **Navradi Nóra**

Klórfeholok redukív dehalogénezése 10-metilakridin-származékok által kiváltott fotokatalízissel (KBSc) Az irodalomból ismert egy olyan módszer, ahol aromás vegyületek dehalogénezésére a 10-metilakridin-származékok által kiváltott fotokatalízist alkalmazzák, redukálószerként NaBH₄-et használva. Az eredeti módszert acetonitril/víz 9/1 arányú elegyben írták le, a fotokatalizátor szubsztitúciós viszonyainak megfelelő kialakításával azonban lehetőség nyílt a vizes közegű alkalmazásra is gyengén lúgos közegben (a NaBH₄ bomlását elkerülendő). Cél az ismertetett alapokon működő dehalogénezési rendszer kidolgozása klórfeholokra, tisztán vizes közegben, ennek tesztelése néhány különböző klórfeholal, valamint az eljárás körülményeinek az optimalizálása. - **Bartus Alexandra**

Klórfeholok redukív dehalogénezése Ru(bpy)₃²⁺ katalizálta fotokatalízissel (KBSc, VMBSc, BMBSc) Egy, az irodalomban leírt módszer szerint halogénezett aromás vegyületekből a halogén eltávolítására a trisz-bipiridil-ruténium(II) komplex fotoaktivitásán alapul. Látható fényvel megvilágítva a rendszert tercier amin jelenlétében, hidrogénforrásként hangyasavat használva hatékony módszert sikerült kidolgozniuk a szerzőknek. Ezen az alapon elindulva meg lehetne vizsgálni a klórfeholok reakcióit is. A leírt rendszer minden komponense vízoldható, és a ruténiumkomplexből igen kis mennyiségekre van szükség, így klórfeholok ipari szennyvizekből történő eltávolítására is alkalmas eljárás kidolgozására van lehetőség homogén közegben, vagy esetleg a ruténiumkomplex heterogénizálásával. Cél az ismertetett alapokon működő redukív dehalogénezési rendszer kidolgozása klórfeholokra. Ennek tesztelése néhány különböző klórfeholal, az eljárás körülményeinek optimalizálása részletes mechanizmusvizsgálatok után (ez utóbbi homogén közegben). Az eljárásban használt tercier aminok kiváltási lehetőségeinek vizsgálata. - **Kozák Viktória, Kozák Éva**

A Fizikai Kémiai Tanszéken meghirdetett TDK-, projekt-, szakdolgozati és diplomamunka-témák

Dr. Ósz Katalin egyetemi docens:

UV-LED fényforrással működő fotoreaktor tesztelése (VMBSc) A feladat egy, a kutatócsoportunkban nemrég elkészült, UV-LED-eket alkalmazó fotoreaktor termosztálásának a megoldása, valamint a gerjesztést végző UV LED-eknek a tesztelése egy irodalomból ismert reakció segítségével. A reakció a S(IV) vizes közegű autooxidációja Ce(III) által indukált fotokatalízissal, ahol a Ce(III) fényelnyelése láncreakciót indít be. Ezen reakciónál lehetőség nyílik a fotoreakció világos és sötét periódusban végbemenő folyamatainak külön-külön spektrofotometriás detektálására. - **Dzsubák Mariann**

Dr. Ósz Katalin egyetemi docens és **Józsa Éva** tudományos segédmunkatárs:

Kinonok bomlástermékeinek pH-függő spektrofotometriás vizsgálata (KBSc, VMBSc, KMSc) A kinonok fény hatására diszproporcióval hidrokinonná és hidroxikinonná alakulhatnak, valamint oxigén felszabadulása közben hidrokinonná redukálódhatnak. A reakció spektrofotometriásan vagy pH-stat mérésekkel jól követhető. Emellett a termékek gyenge savak is (ez biztosítja a pH-stat követés lehetőségét). A feladat a képződő termékek pK_a-ja és redoxi tulajdonságai közötti kapcsolat vizsgálata spektrofotometriás titrálás és ciklikus voltammetria (CV) segítségével. - **Ladó Eszter, Kiss Virág**

A Ce(III)/Ce(IV) rendszer redoxitulajdonságainak a vizsgálata (KBSc, VMBSc) Napjainkban a zöld energiák - köztük az általunk is tanulmányozott napenergia - felhasználása egyre elterjedtebb. A fotokémia területén a legrészletesebben vizsgált folyamat a víz fotokatalitikus bontása, ahol elsőnek a fémkatalizátor, jelen esetben a cérium(III) oxidálódik, miközben a víz redukciója is megfigyelhető. Ezt követi egy úgynevezett sötét reakció, melyben a katalizátor regenerálódik. Ezt a folyamatot korábban viszonylag tömény kénsavas közegben vizsgálták, azonban ez az alkalmazhatóság szempontjából nem ideális, mert meglehetősen korrozív közeget jelent. Az EDTA megfelelő ligandumnak bizonyult a hidrolízis visszaszorítására, így a Ce(III)/Ce(IV)-EDTA rendszer alkalmas lehet a fotokémiai folyamat semleges körülmények közötti alkalmazására. A rendszer tanulmányozásához CV és fotokémiai kinetikai mérések szükségesek. - **Pap Ádám Péter**

A kémiai aktinometriai gyakorlati alkalmazása (KBSc, VMBSc) A feladat a 209-es fizikai kémia laboratóriumi gyakorlat (címe: A trisz(oxalato)vas(III) komplexion fotokémiai bomlásának tanulmányozása) megfelelő mérési körülményeinek a meghatározása ahhoz, hogy 4 órás hallgatói gyakorlatként elvégezhető legyen a mérés. Emellett elvégzendő a különböző fényforrások (pl. fotoreaktor UV-LED-jei, diódasoros spektrofotométer lámpái) által kibocsátott fény fotonintenzitásának meghatározása trisz(oxalato)vas(III) komplexet használó kémiai aktinometria segítségével. - **Ács Zsuzsanna**

A Fizikai Kémiai Tanszéken meghirdetett TDK-, projekt-, szakdolgozati és diplomamunka-témák

OSZCILLÁCIÓS REAKCIÓK, MINTÁZATKÉPZŐDÉS

Dr. Gáspár Vilmos tanszékvezető egyetemi tanár:

Mintázatok képződése gélreaktorban (KBSc, VMBSc) Reakció-diffúzió rendszerekben kialakuló állandósult, mozgó és önreprodukálódó mintázatok kísérleti vizsgálata és jellemzése gélreaktorok és képfeldolgozó programok alkalmazásával. - **Szilágyi Orsolya**

Dr. Póta György egyetemi docens:



Reakciókinetikai problémák elméleti vizsgálata (V, T, VM, KBSc, KMSc) A kémiai reakciók időbeli lefolyását közönséges differenciálegyenletekből álló rendszerek írják le. E rendszerek megoldásával, egyszerűsítésével, a megoldások jellegének felkutatásával egyrészt segítjük a kísérletekben észlelt viselkedésmód értelmezését, másrészt igyekszünk megjósolni új kinetikai viselkedésformákat, amelyek még nem köthetők konkrét kísérleti rendszerekhez. A vizsgálatok elsősorban a multistabilitás, oszcilláció, kémiai erősítés területét célozzák meg. A témához elméleti-matematikai hajlam, informatikai érdeklődés, továbbá a differenciálegyenletek témakörében előírt ismeretek elsajátítása szükséges.

Dr. Rábai Gyula egyetemi tanár:

Oszcillációs reakciók kísérleti tanulmányozása (KBSc, VMBSc) Az oszcillációs reakciók során néhány résztvevő komponens koncentrációja sok szélsőértéket mutat az idő függvényében. A témára jelentkezők megismerik az oszcillációs reakciók irodalmát. Megismerik azt is, hogy milyen mechanisztikus és parametrikus feltételei vannak a kémiai oszcilláció kialakulásának. Elsajátítják azokat a készségeket, amelyek szükségesek egy összetett dinamikai rendszer kísérleti tanulmányozásához. Megismerik a félig nyitott reaktorok és az áramlásos reaktorok működtetésének technikáját. Új oszcillációs reakciók feltárása is célként fogalmazódik meg a témára jelentkezőkkel szemben. - **Krajnák Gergő, Pásztor Péter**



Oszcillációs reakciók számítógépes modellezése (KBSc, VMBSc) Az oszcillációs reakciók során néhány résztvevő komponens koncentrációja sok szélsőértéket mutat az idő függvényében. A témára jelentkezők megismerik az oszcillációs reakciók irodalmát. Megismerik azt is, hogy milyen mechanisztikus és parametrikus feltételei vannak a kémiai oszcilláció kialakulásának. Elsajátítják azokat a készségeket, amelyek szükségesek egy összetett dinamikai rendszer modellezéséhez, a periodikus koncentráció-idő görbék kiszámításához. A modell megalkotása során felvett differenciálegyenlet-rendszereket numerikus módszerrel megoldják. A félig nyitott és az áramlásos reaktorok működésének szimulálását is elvégzik.

A Fizikai Kémiai Tanszéken meghirdetett TDK-, projekt-, szakdolgozati és diplomamunka-témák

RÖNTGENDIFFRAKCIÓS LABORATÓRIUM

Dr. Bényei Attila egyetemi docens:



Átmenetifém komplexek szerkezetének vizsgálata egykristály röntgendiffrakcióval (V, T)
A feladat az egykristály röntgen diffrakciós szerkezet meghatározáshoz használt alapvető programok megismerése, néhány szerkezet megoldása és finomítása.



Folytonos szimmetria mérték hidrogén hidas szerkezetek összehasonlításában (KBSc, VMBSc)
A hidrogénkötéses szerkezetek összehasonlításában egy lehetőség a folytonos szimmetria mérték alkalmazása. Krisztallográfia adatbázis lekérdezését és az adatok feldolgozását jelenti a munka.

Szerkezet meghatározása pordiffrakciós adatokból (KBSc, VMBSc)
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. - **Cseterki Máté**



Krisztallográfiai adatbázisok használata, molekulacsaládok összehasonlítása (GY, KBSc)
Egy megadott molekulacsalád krisztallográfiai adatbázisban való keresése és a szerkezetek összehasonlítása.

Gyógyszerhatóanyagok polimorfizmusa - szabályozási és minőségbiztosítási kérdések (GY, KBSc)
A feladat azon FDA, ICH és gyógyszerkönyvi előírásokat összeszedni és értelmezni, amik a gyógyszerhatóanyag polimorfokra vonatkoznak. - **Kovács Kata**



PETN-reduktáz homológjai röntgendiffrakciós szerkezeteinek összehasonlító elemzése (MBMSc)
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.



PETN-reduktáz röntgendiffrakciós szerkezetének meghatározása, finomítása (MBMSc)
A feladat egy pentaeritrol-trinitrát reduktáz enzim röntgendiffrakciós szerkezetének finomítása szinkrotron mérésrel készült adatkészlet felhasználásával.