

**Fizikai Kémiai Tanszék**  
**meghirdetett témái a**  
**2018/2019. tanév I. félévére**

**Bunda Szilvia, Dr. Udvardy Antal**

(BSc projekt, szakdolgozat, 1 fő)

***Vízoldható Pd(II)-komplexek alkalmazása katalitikus folyamatokban***

A Fizikai Kémiai Tanszéken folyó kutatások alapján elmondható, hogy a vízoldható tetrahidroszalének (szalánok) Pd(II)-komplexei kiemelkedően aktív katalizátoroknak bizonyultak különböző vizes-szerves kétfázisú katalitikus reakciókban (pl. alkil-alkoholok redox izomerizációjában, valamint Sonogashira és Suzuki C-C kapcsolási reakciókban). A hallgató feladata ezen Pd(II)-komplexek további katalitikus reakcióban való alkalmazása. A reakcióelegyet NMR spektroszkópiával és gázkromatográfiás módszerrel elemzi.

**Dr. Kathó Ágnes, Dr. Udvardy Antal**

(Kémia, vegyészmérnök BSc projekt, szakdolgozat, 1 fő)

***Ru-PTA (PTA= foszfaurotopin) komplexek alkalmazása a formiát bontásban***

A Fizikai Kémiai Tanszéken több olyan Ru(II)-PTA (PTA: 1,3,5-triaza-7-foszfaadamantán) komplexet állítottunk elő a közelmúltban, mely előkísérleteink alapján katalizálják a HCOONa bomlását. A reakcióban képződő hidrogéngáz keletkezését gázvolumetriásan lehet követni. A hallgató feladata a nátrium-formiát bontás tanulmányozása, és mechanizmusának feltérképezése.

(Kémia, vegyészmérnök BSc projekt, szakdolgozat, 1 fő)

***Reakciók oldószermentes körülmények között***

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 elhagyjuk azokat. A hallgató feladata a PTA (PTA: 1,3,5-triaza-7-foszfaadamantán) és származékainak az ismert oldószerben végrehajtott átalakításainak megismétlése oldószer távollétében. Kutatócsoportunkban az oldószermentes reakciók kivitelezéséhez rendelkezésre áll egy vibrációs és egy Retsch PM100 bolygóműves-golyós malom. Az anyagok azonosítására multinukleáris NMR, ESI-MS, IR és UV-látható spektroszkópiát használunk.

## **Kiss Virág**

(Vegyészmérnök BSc szakdolgozat, 1 fő, betelt)

### ***2,6-diklór-1,4-benzokinon és kén(IV) reakciójának kinetikai vizsgálata***

A fény hatásának megismerése fotokémiai reakciók vizsgálata során. Gyorskinetikai mérési technika elsajátítása. Reakciómechanizmusok leírása.

(Vegyészmérnök BSc szakdolgozat, 1 fő, betelt)

### ***2-terc-butil-1,4-benzokinon redoxireakciójának vizsgálata***

A fény hatásának megismerése fotokémiai reakciók vizsgálata során. Gyorskinetikai mérési technika elsajátítása. Reakciómechanizmusok leírása.

(Vegyészmérnök BSc szakdolgozat, 1 fő, betelt)

### ***2-metil-1,4-benzokinon keton-biszulfid addíciós reakciójának kinetikai vizsgálata***

A fény hatásának megismerése fotokémiai reakciók vizsgálata során. Gyorskinetikai mérési technika elsajátítása. Reakciómechanizmusok leírása.

(Kémia BSc projekt/szakdolgozat, 1 fő, betelt)

### ***2,6-dimetil-1,4-benzokinon redoxireakcióinak pufferes közegű vizsgálata***

A fény hatásának megismerése fotokémiai reakciók vizsgálata során. Gyorskinetikai mérési technika elsajátítása. Reakciómechanizmusok leírása.

## **Dr. M. Nagy Noémi**

(Vegyészmérnök BSc szakdolgozat, 1 fő, betelt)

### ***Talajok foszfortápanyag-ellátottságának vizsgálata radioaktív nyomjelzéssel***

Heterogén izotópcseré kísérletekkel vizsgáljuk, hogy a talajra juttatott foszforműtrágya milyen hányada elérhető a növények számára. Meghatározzuk, milyen a foszfortranszport sebessége steady-state állapotban a talaj és a talajoldat között. A radioaktív nyomjelzős módszer egyedülálló lehetőség ezeknek a növénytáplálás, műtrágya-hasznosítás szempontjából fontos jellemzőknek a meghatározására.

(Vegyész MSc diplomamunka, 1 fő, betelt)

### ***Radioaktív anionok megkötése módosított agyagkőzeten***

A nukleáris hulladék földalatti 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 kémiai úton úgy módosítani, hogy azok a radioaktív anionokat is megkössék. A munka során ezeket a módosítási lehetőségeket, illetve anionos jellegű radionuklidok megkötését vizsgáljuk.

## **Dr. Purgel Mihály**

(Vegyész MSc diplomamunka, 1fő, betelt)

### ***Palládium-szalán komplexek katalitikus aktivitásának vizsgálata kvantumkémiai módszerekkel***

A palládium(II)-szalán komplex és annak származékai hatékony katalizátorai számos reakciónak. Célunk a Suzuki kapcsolási reakció mechanizmusának felderítése kvantumkémiai módszerekkel.

## **Dr. Novák Levente**

(MSc diplomamunka, 1fő)

### ***Amid kötés kialakítása termikus reakcióval poláris aprotikus közegben***

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.

(BSc projekt/szakedolgozat, 1fő), (MSc diplomamunka, 1fő)

### ***Funkcionalizált makromolekulák szintézise és jellemzése***

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 az adott felhasználási területhez (kolloidális katalízis, környezetvédelem, mágneses kontrasztanyagok) legalkalmasabb fémkomplexeik viselkedését.

(BSc projekt/szakedolgozat, 1fő)

### ***Bevont álló fázisú kromatográfiás kolonnák specifikus elválasztási feladatokra***

Az analitikai módszerek közül az egyik legsokoldalúbb módszer a nagy hatékonyságú folyadékkromatográfia (HPLC). Segítségével mind szervetlen-, mind szerves vegyületeket hatékonyan elválaszthatunk komplex összetételű elegyekből, feltéve, hogy a megfelelő álló- és mozgófázist használjuk az analízishez. Az állófázisok lényegesen kevesebb változatban érhetők el, mint a lehetséges mozgófázisok gyakorlatilag korlátlan száma. Ebből az okból kifolyólag a legtöbb analízis valamilyen szokványos reverz fázissal történik és az optimalizálás során az eluens összetételét változtatják. Lehetséges azonban kereskedelmi kolonnák álló fázisának utólagos módosítása, az így előállított rétegek lehetnek ideiglenesek vagy tartósak. Ilyen bevonatok használatával lehetőség nyílik csökkentett szerves oldószer tartalmú (vagy akár teljesen vizes közegű) eluens használatára, az analízisidő szignifikáns csökkentésére, a detekció érzékenységének vagy az elválasztás hatékonyságának jelentős növelésére. A projektmunka/szakedolgozat ideje alatt kereskedelmi HPLC kolonnák felületét módosítjuk, és vizsgáljuk a módosítás hatását a kromatográfiás elválasztás paramétereire, új módszereket dolgozunk ki nehezen elválasztható komponenselegyek vizsgálatára.

(BSc projekt/szakedolgozat, 1fő)

### ***Vizes fázisú méretkizárásos folyadékkromatográfia***

A szokványos HPLC technikákkal szemben a méretkizárásos folyadékkromatográfia (SEC) nem felületi megoszláson alapuló módszer, hanem az analizálandó minta komponensei által a porózus álló fázisban bejárt térfogat alapján választja el a komponenseket. A SEC nagyon fontos eszköz polimerek szintézise és módosítása során a molekulák hidrodinamikai sugarának és ebből származtatva molekulatömegének és molekulatömeg-eloszlásának meghatározására és a tisztítási folyamat követésére. Az általunk használt vizes közegű SEC a szerves oldószer fázisú elválasztásokhoz viszonyítva több technikai nehézséget hordoz, mert poláris oldatokban előtérbe kerülnek azok a zavaró minta-mátrix kölcsönhatások (pl. ionos vagy hidrogénkötés), amelyek apoláris közegben sokkal kisebb jelentőségűek. Munkánk során különböző makromolekulák, funkcionális polimerek és oligomerek kromatográfiás elválasztását fogjuk optimalizálni, továbbá tervezzük méretkalibrációs sztenderdek is használható olcsón megvásárolható vagy előállítható vegyületek jellemzését.

## **Dr. Bányai István**

(Kémia, vegyészmérnök, BSc projekt, szakedolgozat vagy vegyész/vegyészmérnök MSc diplomamunka, 2fő)

### ***Porózus anyagok relaxometriás vizsgálata és diffúziometriás vizsgálata***

A porózus anyagok a heterogén katalitikus és a környezeti adszorpciós folyamatokban rendkívül nagy szerepet játszhatnak a nagy fajlagos felületük révén. Jellemzésük, azaz a porozitás, a pórusméret eloszlás meghatározása kulcskérdés. Erre implementálunk kis- és nagyterű NMR módszereket. A mérések alapja az NMR relaxometria, diffúziometria és krioporozimetria.

(vegyéssz mérnök BSc szakdolgozat, 1 fő, betelt)

### ***Makromolekulás poliaminokarboxilátok szerkezetvizsgálata***

A polimervázak funkcionálizálása nem könnyű szintetikus feladat. Általában véve ennél is nehezebb a funkcionálizálás mértékének meghatározása. Erre pH-potenciometriás technikát alkalmazhatunk, de számolni kell a protonálódási folyamatok szterikus gátlásával, valamint az elektromos kettősréteg szerepével. A megoldás két, esetleg három módszer kombinálása lehet. Az NMR a leghatékonyabb szerkezetvizsgáló módszer oldat illetve nem kristályos fázisban. A makromolekulák esetében a relaxációs effektusok megnehezítik az alkalmazását. A két módszer kombinálása eredményes lehet. A makromolekulás poliaminokarboxilátok nagyon hatékony komplexképzők lehetnek mind környezetkémiai, mind gyógyszerkémiai szempontból.

(vegyész/vegyéssz mérnök MSc diplomamunka, 1 fő, betelt)

### ***Viaszok olajtartalmának vizsgálata***

A viaszok olajtartalma azok rendkívül fontos jellemezője. Több szabványos eljárás, klasszikus analitika, gázkromatográfiás mérés is szabványosított, de ezek egymástól rendkívül különböző eredményeket adnak. NMR módszerre is van, elsősorban kistertű relaxométerekre kifejlesztve, de ez nem elfogadott. A munka célja az NMR relaxometriás módszer fejlesztése és kalibráció nélkül eljárás kidolgozása, esetenként nMR csőbe nem tölthető anyagokra: NMR MOUSE technika.

(vegyész/vegyéssz mérnök MSc diplomamunka, 1 fő, betelt)

### ***Polielektrolitok vizsgálata potenciometriás titrálással***

A vízdoldható polielektrolitok funkciós csoportjainak minőségi és mennyiségi meghatározása a leggyakrabban potenciometriás titrálással kivitelezhető. Az eredmények értékelése ugyanakkor már kevésbé egységes, hiszen a klasszikus protonálódási egyensúly mellett a kettősréteg kialakulásával is számolni kell. A kísérleti körülmények szisztematikus változtatásával a rendszerek előnyösebben vizsgálhatók, amely e diplomamunka célja.

## **Dr. Bányai István, Dr. Nagy Zoltán**

(BSc projekt/szakdolgozat, 1 fő, betelt)

### ***Vízdoldható polimerek hidratációjának vizsgálata***

A polietilén-glikol gyakran használt vegyület kovalens kapcsolással, vagy szolubilizáció révén vízben nem oldódó komponensek oldatba vitelére. A vegyület szerkezete és tulajdonsága jelentősen megváltozhat a hidratáció révén. NMR diffúziómetria és relaxometria segítségével próbáljuk feltérképezni a víztartalom növekedésére bekövetkező szerkezeti változásokat.

## **Dr. Béneyi Attila**

(vegyész/ vegyészmérnök MSc diplomamunka, kémia/vegyészmérnök BSc projektmunka vagy szakdolgozat, 1 fő)

### ***Átmenetifém komplexek szerkezetének vizsgálata egykristály röntgendiffrakcióval***

A feladat az egykristály röntgen diffrakciós szerkezet meghatározáshoz használt alapvető programok megismerése, néhány szerkezet megoldása és finomítása.

(vegyész/ vegyészmérnök MSc diplomamunka, kémia/vegyészmérnök BSc projektmunka vagy szakdolgozat, 1 fő)

### ***Folytonos szimmetria mérték hidrogén hidas szerkezetek összehasonlításában***

A hidrogénkötéses szerkezetek összehasonlításában egy lehetőség a folytonos szimmetria mérték alkalmazása. Krisztallográfia adatbázis lekérdezését és az adatok feldolgozását jelenti a munka.

(vegyész/ vegyészmérnök MSc diplomamunka, kémia/vegyészmérnök BSc projektmunka vagy szakdolgozat, 1 fő)

### **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.

(vegyész/ vegyészmérnök MSc diplomamunka, kémia/vegyészmérnök BSc projektmunka vagy szakdolgozat, 1 fő)

### ***Krisztallográfiai adatbázisok használata, molekulacsaládok összehasonlítása***

Egy megadott molekulacsalád krisztallográfiai adatbázisban való keresése és a szerkezetek összehasonlítása.

(vegyész/ vegyészmérnök MSc diplomamunka, kémia/vegyészmérnök BSc projektmunka vagy szakdolgozat, 1 fő)

### ***PETN-reduktáz homológjai röntgendiffrakciós szerkezeteinek összehasonlító elemzése***

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.

## **Dr. Kéri Mónika**

(BSc projekt/szakdolgozat, 1 fő, betelt)

### ***Szén aerogélek vizsgálata NMR technikákkal***

Rezorcín-formaldehid szén aerogél pórusméret-eloszlásának és a pórusok alakjának meghatározása krioporozimetriás módszerrel. A pórusok nedvesíthetőségének és a porózus szerkezet kialakulásának vizsgálata folyékony, apoláris közegben relaxometriás módszerrel.

(BSc projekt/szakdolgozat, 1 fő, betelt)

***Szilika alapú aerogélek vizsgálata NMR technikákkal***

Zselatinnal vagy más módon módosított szilika aerogélek, mint pórusos gyógyszerhordozó közegek pórusméret-eloszlásának és a pórusok alakjának meghatározása krioporozimetriás módszerrel. A pórusok nedvesíthetőségének vizsgálata különböző polaritású folyékony közegben relaxometriás és krioporozimetriás módszerrel.

**Dr. Kálmán Ferenc Krisztián, Botár Richárd**

(kémia BSc projekt/szakdolgozat, 1 fő, betelt)

***A PC2A-NP ligandum előállítása és átmeneti fémekkel kialakuló komplexei egyensúlyi viszonyainak tanulmányozása***

A téma egyik fele maga a PC2A-NP ligandum szintézisével foglalkozik. Az intelligens pH-szenzor kontrasztanyagának szánt makrociklust építőköveiből tervezzük szintetizálni számos védőcsoport használata segítségével. A makrociklus zárása után az intelligens funkcióért felelős oldalláncot helyezük fel a ciklusra. Preparatív HPLC-n való tisztítást követően tervezzük a ligandum koordinációs kémiai vizsgálatát. pH-potenciometria és UV-Vis spektrofotometria segítségével meghatározzuk a ligandum protonálódási és különböző, szervezetben megtalálható fémionokkal kialakuló komplexeinek stabilitási- és protonálódási állandóit. <sup>1</sup>H-relaxometria alkalmazásával vizsgáljuk a Mn(II)-komplex relaxivitásának pH-függését.