

**Bányai István:**

*Ásványok és kőzetek NMR relaxometriás vizsgálata (kémia vagy vegyészmérnök BSc, vegyész vagy vegyészmérnök MSc, 2 fő, 1 szabad hely)*

*Porózus és keresztkötött polimerek és makromolekulák NMR relaxometriás vizsgálata (vegyész vagy vegyészmérnök MSc, 1 fő, 1 szabad hely)*

**Bányai István, Novák Levente:**

*Makromolekulás fémkomplexek vizsgálata (kémia vagy vegyészmérnök BSc, 2 fő, 2 szabad hely)*

**Bényei Attila:**

*Átmenetifém komplexek szerkezetének vizsgálata egykristály röntgendiffrakcióval (kémia vagy vegyészmérnök BSc, vegyész vagy vegyészmérnök MSc, 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 (kémia vagy vegyészmérnök BSc, vegyész vagy vegyészmérnök MSc, 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.

*Szerkezet meghatározása pordiffrakciós adatokból (kémia vagy vegyészmérnök BSc, vegyész vagy vegyészmérnök MSc, 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, molekulacsaldok összehasonlítása (kémia vagy vegyészmérnök BSc, vegyész vagy vegyészmérnök MSc, 1 fő, 1 szabad hely)***

Egy megadott molekulacsald krisztallográfiai adatbázisban való keresése és a szerkezetek összehasonlítása. A másodlagos kölcsönhatások elemzése.

***PETN-reduktáz homológjai röntgendiffrakciós szerkezeteinek összehasonlító elemzése (kémia vagy vegyészmérnök BSc, vegyész vagy vegyészmérnök MSc, 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 példákön keresztül, a PETN-reduktáz kristályairól gyűjtött adatok feldolgozása, a szerkezet megoldása.

***Use of crystallographic database (1 person)***

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.

**Czégéni Csilla:**

***Rh(I)-di-NHC-komplex előállítás, szerkezetmeghatározása és katalitikus tulajdonságainak vizsgálata (kémia vagy vegyészmérnök BSc, 1 fő, nincs szabad hely)***

Az irodalomban az N-heterociklusos karbén (NHC) ligandumok többsége egyfogú ligandum és csak kevés kétfogú di-N-heterociklusos ligandum ismert. A tanszéken már régóta foglalkozunk stabil N-heterociklusos karbén-komplexek vizsgálatával. A feladat a kétfogú Rh(I)-di-NHC-komplex előállítás, tisztaságellenőrzése és

szerkezetvizsgálata valamint a komplex fenilacetilén polimerizációs reakciójában mutatott katalitikus aktivitásának vizsgálata.

***Nitrilek amidokká történő szelektív hidratálása Rh(I)-NHC komplex katalizátorokkal*** (kémia vagy vegyészmérnök BSc, 1 fő, nincs szabad hely)

A nitrilek amidokká történő szelektív hidratálása fontos mind az ipar, mind a gyógyszergyártás szempontjából. Az utóbbi évtizedben számos átmenetifém komplex (Au, Cu, Ru) katalizált módszert publikáltak, azonban kevés Rh(I)-komplex katalizálta nitril hidratálásról szóló cikk jelent meg. A feladat az NHC-komplexek előállítása, szerkezet jellemzése és katalitikus tulajdonságainak felderítése.

**Kathó Ágnes, Udvardy Antal:**

***Ru-PTA (PTA= foszfaurotropin) komplexek alkalmazása a formiát bontásban*** (kémia vagy vegyészmérnök BSc, 1 fő, 1 szabad hely)

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

***Reakciók oldószermentes körülmények között*** (kémia vagy vegyészmérnök BSc, 2 fő, 1 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 golyósmalomban való őrléssel. 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-golyós malom. A vegyületek azonosítására multinukleáris NMR, ESI-MS, IR és UV-látható spektroszkópiát és gázkromatográfiát alkalmazunk.

**Kálmán Ferenc, Botár Richárd:**

*Mn(II)-alapú, Zn(II)-szenzitív kontrasztanyagok koordinációs kémiai vizsgálata*(kémia vagy vegyészmérnök BSc, vegyész vagy vegyészmérnök MSc, 2 fő, nincs szabad hely)

**Nagy Noémi, Buzetzky Dóra:**

*Talajok foszfortápanyag-ellátottságának vizsgálata radioaktív nyomjelzéssel* (kémia vagy vegyészmérnök BSc, 2 fő, 1 szabad hely)

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 növénytaplálás, műtrágya-hasznosítás szempontjából fontos jellemzőknek a meghatározására. Olyan hallgató jelentkezését várjuk, aki vállalni tudja, hogy a növényfejlődés által megkívánt április közei, illetve júniusi időpontban tud dolgozni intenzíven.

**Nagy Noémi, Buzetzky Dóra, Kovács Eszter Mária:**

*Radioaktív anionok megkötése módosított agyagkőzeteken/kettős hidroxidokon*(kémia BSc és vegyész MSc, 3 fő, nincs 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 kémiai úton úgy módosítani, hogy azok a radioaktív anionokat is megkössék. A munka során ezeket a módosítási lehetőségeket, illetve anionos jellegű radionuklidok megkötését vizsgáljuk.

## **Novák Levente:**

***Amid kötés kialakítása termikus reakcióval poláris aprotikus közegben*** (vegyész vagy vegyészmérnök MSc, 1 fő, nincs 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 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*** (kémia vagy vegyészmérnök BSc, 2 fő, 2 szabad hely, vegyész vagy vegyészmérnök 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 az adott felhasználási területhez (kolloidális katalízis, környezetvédelem, mágneses kontrasztanyagok) legalkalmasabb fémkomplexeik viselkedését.

***Bevont álló fázisú kromatográfias kolonnák specifikus elválasztási feladatokra***  
(kémia vagy vegyészmérnök BSc, 1 fő, nincs szabad hely)

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) eluensek használatára, az analízisidő szignifikáns csökkentésére, a detekció érzékenységének vagy az elválasztás hatékonyságának jelentős növelésére. A projekt munka/szakdolgozat ideje alatt kereskedelmi HPLC kolonnák felületét módosítjuk, és vizsgáljuk a módosítás hatását a kromatográfias elválasztás paramétereire, új módszereket dolgozunk ki nehezen elválasztható komponenselegyek vizsgálatára.

***Vizes fázisú méretkizárásos folyadékkromatográfia***(kémia vagy vegyészmérnök BSc, 1 fő, 1 szabad hely)

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, funkcionizált polimerek és oligomerek kromatográfias elválasztását fogjuk optimalizálni, továbbá tervezzük méretkalibrációs

sztenderdnek is használható olcsón megvásárolható vagy előállítható vegyületek jellemzését.

## **Purgel Mihály:**

*Átmenetifém-komplexek szerkezeti vizsgálata kvantumkémiai módszerekkel (kémia vagy vegyészmérnök BSc, 2 fő, 2 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 vagy vegyészmérnök BSc, 2 fő, 2 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.

## **Tircsó Gyula:**

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 ( $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$ ,  $^{17}\text{O}$  és  $^{31}\text{P}$ ) egy, ill. többdimenziós és TD, ill. HPLC-s (analitikai és preparatív) módszerekre alapozunk.



*Átmenetifém-komplexek egyensúlyi, <sup>1</sup>H-relaxometriás és kinetikai jellemzése (kémia vagy vegyészmérnök BSc)*

*Fémion alapú PET (Pozitron Emissziós Tomográfia) diagnosztikumok előállítása, egyensúlyi és kinetikai jellemzése (kémia vagy vegyészmérnök BSc)*

*Mn<sup>2+</sup>-alapú intelligens MRI kontrasztanyagok előállítása és jellemzése (vegyész MSc, gyógyszerész szak)*

*Preparation and characterization of Mn(II)-based smart contrast agents (1 person)*

**Tircsó Gyula, Csupász Tibor:**

*Makrociklusban oxigénatomot tartalmazó komplexképzők előállítása (kémia vagy vegyészmérnök BSc)*

**Tircsó Gyula, Garda Zoltán:**

*Nyíltláncú és makrociklusos ligandumok Mn(II)-ionnal képződő komplexeinek egyensúlyi, <sup>1</sup>H-relaxometriás és kinetikai jellemzése (kémia vagy vegyészmérnök BSc, 2 fő)*

**Tircsó Gyula, Tóth-Molnár Enikő:**

*A Mn<sup>2+</sup>-ion makrociklusos ligandumokkal alkotott komplexeinek koordinációs kémiai jellemzése (kémia vagy vegyészmérnök BSc, 1 fő)*

**Tóth Imre:**

*(CN)<sub>5</sub>PtTl komplex kölcsönhatása kis szerves molekulákkal (2 fő)*

A direkt fém-fém kötést tartalmazó (CN)<sub>5</sub>PtTl kiindulási anyagból inert, lehetőleg tetraéderes Tl(III) centrumot tartalmazó adduktum előállítása és egyensúlyi, szerkezeti vizsgálata a feladat.



**Tóth Imre, Botár Richárd:**

*Jodid-kötő fémkomplexek vizsgálata (1 fő)*

Tl(III)-szerves ligandum (L) rendszerek TILI vegyeskomplekként képesek jodid iont megkötni. Az TILI vegyeskomplexek egyensúlyi, szerkezeti és kinetikai jellemzése a feladat.

**Tóth Imre, Csupász Tibor:**

*Fluorid-kötő fémkomplexek vizsgálata (1 fő)*

Al(III)-szerves ligandum (L) rendszerek ALLF vegyeskomplekként képesek fluorid iont megkötni. Az ALLF és hasonló (pl. Sb-tartalmú) vegyeskomplexek egyensúlyi, szerkezeti és kinetikai jellemzése a feladat.

*Fluorid binder metal complexes (1 person)*

**Tóth Imre, Horváth Dávid:**

*Bi(III)-makrociklusos (MC) komplexek képződés-kinetikai vizsgálata (1 fő)*

Az erősen hidrolizáló Bi(III) akva ionként csak extrém savas közegben létezik, ilyen körülmények között pl. a DOTA-komplexének képződése nagyon lassú. A feladat a BiMC képződés segédligandumok (citrát, halogenidek) jelenlétében való vizsgálata.