

# A Fizika Kémiai Tanszéken meghirdetett projekt-, szakdolgozat- és diplomamunka témák

Dr. Bényei Attila tudományos főmunkatárs:

- **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, KMSc)**  
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, KMSc)**  
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 (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.
- **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 méréssel készült adatkészlet felhasználásával.
- **Formalin gyártás optimalizálása - anyagmérleg felállítása (VMBS)**  
A BC-KC Formalin Kft. Kazincbarcán gyárt formaldehidet. A feladat a gyártás során keletkező oldatok (vizes-alkoholos formaldehyd) valamint gázok (CO, CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>) elemzése és egy megbízható anyagmérleg felállítása. Különösen fontos megvizsgálni, hogy a katalizátor üzemi hőmérsékletét változtatva hogyan változik az egyes komponensek aránya és ennek ismeretében javaslatot tenni a gyár gazdaságosabb üzemeltetésére.

Dr. Horváth Henrietta tudományos segédmunkatárs:

- **Ru(II)-etiléndiamin komplexek előállítása (KBSc)**

Dr. Joó Ferenc egyetemi tanár:

- **Vízoldható átmenetifém komplex katalizátorok szintézise (V, T, VM, KBSc, VMBSce)**

A katalizátorok vízoldhatósága két fő szempontból lehet fontos. Egyrészt alkalmasak olyan szubsztrátumok homogén oldatreakcióinak katalízisére, melyek elsősorban vagy kizárólag csak vízben oldódnak (pl. szénhidrátok). Másrészt a vízben nem oldódó szubsztrátumok reakcióit vizes-szerves kétfázisú rendszerekben hajtjuk végre, amikor is a katalizátor a vizes fázisban visszanyerhető és újólapon felhasználható.

Feladat: Vízoldható N-heterociklusos karbének ill. prekursoraik előállítása. Az N-heterociklusos karbének az átmenetifém ionokkal igen stabilis komplexeket alkotnak, melyek közül sok jó katalitikus aktivitást mutat hidrogénezés, C-C kapcsolás, olefin metatézis, stb. reakciókban. Célunk ilyen katalizátorok vízoldható változatainak előállítása.

- **Katalízis a környezetbarát kémiában: Ionos folyadékok alkalmazása egy- és kétfázisú katalitikus hidrodehalogénezési reakciók oldószereként. (V, VM, KBSc, VMBSce)**

A környezetbarát (zöld) kémia gyakran alkalmaz katalitikus módszereket. Ugyancsak egyre gyakoribb a víz és az ún. ionos folyadékok, mint oldószerek használata szerves oldószerek helyettesítésére.

- **Katalitikusan aktív fémkomplexek rögzítése hordozókon: Ionos komplexek rögzítése szerves és szervetlen ioncserélőkön (V, VM, KBSc, VMBSce)**

Az oldható fémkomplex katalizátorok egyik előnye a molekuláris diszperzitás, amikor valamennyi fémion részt vehet a katalízis folyamatában. Hátrányuk viszont az, hogy egyszerű módszerekkel nem könnyen választhatók el a termékelegtől. Szilárd hordozó felületére rögzített komplexek szerencsés esetben egyesíthetik a homogén és heterogén katalizátorok előnyös tulajdonságait. Amennyiben a hordozó mágneses sajátságú, akkor szűrés helyett mágneses dekantálást alkalmazhatunk. A rögzített katalizátorok átfolyó rendszerű (állóágyas) reaktorokban is használhatók.

- **Katalitikusan aktív fémkomplexek rögzítése hordozókon: Komplex katalizátorok rögzítése mágneses vas-oxid hordozón (V, VM, KBSc, VMBSce)**

Az oldható fémkomplex katalizátorok egyik előnye a molekuláris diszperzitás, amikor valamennyi fémion részt vehet a katalízis folyamatában. Hátrányuk viszont az, hogy egyszerű módszerekkel nem könnyen választhatók el a termékelegtől. Szilárd hordozó felületére rögzített komplexek szerencsés esetben egyesíthetik a homogén és heterogén katalizátorok előnyös tulajdonságait. Amennyiben a hordozó mágneses sajátságú, akkor szűrés helyett mágneses dekantálást alkalmazhatunk. A rögzített katalizátorok átfolyó rendszerű (állóágyas) reaktorokban is használhatók.

- **Katalitikusan aktív fémkomplexek rögzítése hordozókon: Rögzített komplexek alkalmazása hidrogénezési folyamatok katalízisére az H-Cube mikrofluidikai elvű reaktorban (V, VM, KBSc, VMBSc)**

Az oldható fémkomplex katalizátorok egyik előnye a molekuláris diszperzitás, amikor valamennyi fémion részt vehet a katalízis folyamatában. Hátrányuk viszont az, hogy egyszerű módszerekkel nem könnyen választhatók el a termékelegtől. Szilárd hordozó felületére rögzített komplexek szerencsés esetben egyesíthetik a homogén és heterogén katalizátorok előnyös tulajdonságait. Amennyiben a hordozó mágneses sajátságú, akkor szűrés helyett mágneses dekantálást alkalmazhatunk. A rögzített katalizátorok átfolyó rendszerű (állóagyas) reaktorokban is használhatók.

- **Homogén katalitikus hidrogénátvitel: Hantzsch-észterek előállítása (V, VM, KBSc, VMBSc)**

A hidrogén gázzal végzett hidrogénezések helyett sok esetben előnyösebb a katalitikus hidrogénátvitel a szubsztrátumra egy megfelelő hidrogén donor vegyületről. Gyakran alkalmazott H-donorok a hangyasav (ill. sói) vagy szekunder alkoholok, pl. 2-propanol. E témakörben a biológiai H-donorok (pl. NADH) analógjainak ilyen célú felhasználását vizsgáljuk.

Feladat: Elsősorban irodalmi leírás ill. azok módosítása révén vízben oldódó Hantzsch észterek előállítása a cél.

- **Homogén katalitikus hidrogénátvitel: Hantzsch-észterek alkalmazása hidrogén donorként telítetlen aldehidek hidrogénezésében Ru(II)-foszfinkomplexekkel (V, VM, KBSc, VMBSc)**

A hidrogén gázzal végzett hidrogénezések helyett sok esetben előnyösebb a katalitikus hidrogénátvitel a szubsztrátumra egy megfelelő hidrogén donor vegyületről. Gyakran alkalmazott H-donorok a hangyasav (ill. sói) vagy szekunder alkoholok, pl. 2-propanol. E témakörben a biológiai H-donorok (pl. NADH) analógjainak ilyen célú felhasználását vizsgáljuk.

Feladat: A telítetlen aldehidek reakciói alkalmat adnak annak eldöntésére, hogy a katalizátor milyen mértékben szelektív a C=C vagy a C=O kötés hidrogénezésére.

- **A Kossuth Lajos Tudományegyetem és a Debreceni Egyetem kémikus díszdoktorainak munkássága (T)**

Az évek során a DE és jogelődje, a KLTE számos kiváló kémikust avatott díszdoktorává. Életük és kutatói pályájuk eseményeiből, elért eredményeikből ma is sokat tanulhatunk. A feldolgozás során külön figyelmet érdemel a debreceni ill. magyarországi kémiához fűződő kapcsolatuk.

▪ **Fémkomplexek és nanoméretű fémkolloidok nem-konvencionális alkalmazásai a katalízisben:**

A hagyományos szerves oldószerek hátrányait kiküszöbölendő egyre gyakrabban alkalmazzák reakcióközegként a vizet és az ionfolyadékokat (melyeket alacsony olvadáspontú sóként definiálhatunk). A polimerekkel stabilizált fémkolloidok ionfolyadékokban való viselkedéséről viszonylag kevés az ismeret, a katalitikusan aktív, Pt-fémeket tartalmazó komplexek jelentős része pedig ezekben a felsorolt oldószerekben nem vagy alig oldódik. Ha azonban a katalizátorok oldékonyságát megfelelő átalakítással megnöveljük, akkor ún. kétfázisú katalízis hajtható végre: a szerves fázisban oldott átalakítandó anyag az alternatív oldószerben lévő katalizátorral kizárólag keverés mellett reagál, ennek megszüntetésével a katalizátort tartalmazó fázis könnyen elválasztható a terméktől, majd ismételt felhasználható. A komplexek módosításával szilárd fázishoz (pl. a poláris csoport révén ioncserélőhöz) való rögzítés is megvalósítható, ami ugyancsak a katalizátor újbóli felhasználását teszi lehetővé.

A katalizátor oldékonyságának növelése a ligandum poláris csoporttal való ellátásával lehetséges. A módosított ligandummal előállított komplexek jellemzésére főként multinukleáris NMR-méréseket, míg katalitikus aktivitásának vizsgálatára általában kromatográfiás (GC, HPLC), NMR-spektroszkópiás méréseket alkalmazunk.

- **Polimerrel stabilizált Pd-szól hidrogénező és hidrodehalogénező sajátosságainak vizsgálata vízben és ionfolyadékokban** (V, VM, T, KBSc, VMBSz)
- **Szolubilizálás cukoroldatokkal** (V, VM, T, KBSc, VMBSz)
- **Halogenidionok hatása a poláris oldószerekben végbemenő katalitikus reakciókban** (V, VM, T, KBSc, VMBSz)
- **Új vízoldható foszfinok és Pt-fémekkel képzett komplexeik előállítása** (V, VM, T, KBSc, VMBSz)
- **Vízoldható foszfinok Pt-fémekkel képzett komplexeinek szilárd fázishoz való rögzítése és katalitikus alkalmazása** (V, VM, T, KBSc, VMBSz)

▪ **Katalitikus reakciók oldószerkeverégekben:**

A víz számos egyedi tulajdonsággal bír, és irodalmi adatok alapján a jelenléte akkor is hozzájárulhat egy reakció meggyorsításához, ha a reaktánsok nem oldódnak benne („on water” reakciók). Az átalakítandó vegyületek jelentős része nem vízoldékony, de pl. víz-alkohol elegyekben már homogén oldatokat kaphatunk vízoldható katalizátorok vagy H-donorok alkalmazása esetén is.

A korábban már vizsgált kétfázisú katalitikus reakciókat oldószerkeverégekben kívánjuk tanulmányozni annak érdekében, hogy az eddigi előkísérletek során tapasztalt aktivitás növekedést megérthessük. Elsősorban vízoldható Ru-foszfinokomplexek hidrogénező és H-átviteli sajátosságait tervezzük felderíteni i-propanol-víz elegyekben

- [RuCl<sub>2</sub>(pta)<sub>4</sub>] katalitikus aktivitása i-propanol-víz elegyekben (pta =1,3,5-triaza-7foszfa-adamantán, az urotropin foszforanalogonja) (V, VM, T, KBS, VMBS)
- Félszendvics Ru-komplexek katalitikus aktivitása i-propanol-víz elegyekben (V, VM, T, KBS, VMBS)

▪ **Kémia a háztartásban** (T, KBS)

Mindennapi életünket számos olyan folyamat kíséri (pl. tojást sütünk, kezet mosunk), amelyek nem úgy rögződnek bennünk, hogy valamilyen kémiai reakciót végzünk. Igen sokféle olyan vegyszert (tisztítószer, élelmiszeradalékot stb.) is alkalmazunk, melyekről a szakmában nem jártas gyakran kevés vagy félrevezető információval rendelkezik. A köznapi életben előforduló ilyen típusú jelenségek értelmezése tehát mindenképpen szükséges, de ugyanakkor ez az elemzés alkalmas lehet a kémia iránti érdeklődés felkeltésére is.

A feladat: az érdekesebb, a figyelmet felkeltő példák összegyűjtése és közérthető formában való magyarázata (esetleg szemléltető kísérletekkel együtt).

▪ **Ru-komplexek gyógyászati alkalmazása** (T, GY, ODLA)

Bár a gyógyszereket általában valamilyen bonyolult szerves molekulával szokták azonosítani, a szervetlen fémkomplexek is hatalmas előrelépést eredményeztek a legkülönbözőbb terápiaiban. Az utóbbiak közül talán a legismertebb a rák gyógyításában alkalmazott cisz-platin, de éppen a tumor ellenes szerek között vannak más fémiont, így pl. Ru-t tartalmazók is. Ezek bemutatása mellett másféle betegségek gyógyításában használt Ru-komplexek ismertetése is szerepel a célok között.

**Dr. Nagy István egyetemi docens:**

▪ **Vezető polimerok és kompozitok vizsgálata** (V, T, KBS)

A munka során vezető polimerok és kompozitok anyagtudományi, mérnöki szempontú vizsgálata folyik elsősorban az alkalmazás területeinek feltérképezése céljából. A tevékenység átfogja a mechanikai, termikus, illetve elektronikai, esetlegesen elektro-optikai tulajdonságok megismerését, illetve ezek ismeretében a konkrét alkalmazások felé mutató kísérleti munkát (pl. elektroszintézis, szenzorok, stb.).

▪ **Az infravörös spektroszkópia és mikroszkópia alkalmazási lehetőségei a gyógyszer-technológiában, a diagnosztikában, és a vegyiparban** (V, T, ODLA, Ktud, GY, KBS)

A munka során gyakorlati problémák, illetve ilyeneket modellező anyagi rendszerek infravörös spektroszkópiái (ATR, DRIFT, CIRCLE) és mikroszkópiái vizsgálata folyik kifejezetten azzal a céllal, hogy valamely valós kutatás-fejlesztési, minőségbiztosítási vagy minőségfejlesztési területen az eredmények hasznosíthatóak legyenek. Szükség esetén egyéb kiegészítő módszerek (HPLC, TG, DTG, DSC, VIS-UV, NMR, ESR) alkalmazására is sor kerül a feladat megoldásának érdekében.

- **Az ambrosia elatior (parlagfű) növény hatóanyagának vizsgálata (V, T, ODLA, Ktud, GY, KBCSc)**

A téma feldolgozása komplex. A feladat része más tanszékekkel együttműködve a parlagfű megfelelő kivonatának műszeres analitika, mikrobiológiai, biológiai illetve allergológiai vizsgálata. A munka célja olyan, gyakorlatilag is hasznosítható termékcsoporthoz előállítás, mely része a környezetvédelmi és vízügyi minisztérium támogatását is bíró IPR (Iparszerű Parlagfűfeldolgozási Rendszer) technológiának.

**Dr. Ósz Katalin egyetemi adjunktus:**

- **Fémkomplexek által katalizált reakciók mechanizmusának vizsgálata (V, T, KBCSc, KMSc)**  
Számos, ipari folyamatokban is fontos szintetikus reakciót hatékonyan gyorsítanak a különféle fémionokat és ligandumokat tartalmazó katalizátor komplexek. Ezen reakciók részletes kinetikai vizsgálata segítségével felderíthetjük a folyamatok mechanizmusát, és ezáltal lehetőség nyílik arra, hogy a mechanizmusba beavatkozva gyorsabbá és/vagy szelektívebbé tudjuk tenni a szintetikus reakciót.
- **Napenergia hasznosításának a lehetőségei (V, T, KBCSc, KMSc)**  
Vannak olyan fotokémiai aktív rendszerek (pl. egyes fémionok, illetve ezek komplexei), melyek képesek a fény energiáját kémiai energiává konvertálni pl. azáltal, hogy megvilágítás (akár napfény) hatására katalizálják a víz bontását hidrogénre és oxigénre. Ezek a reakciók viszonylag bonyolult kinetika szerint játszódnak le, és ezen kinetikai megértése közelebb visz a napenergia hatékonyabb felhasználásához.

**Dr. Póta György egyetemi docens:**

- **Reakciókinetikai problémák elméleti vizsgálata (V, T, VM, KBCSc, 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.
- **Számítógépek alkalmazása a kémiaoktatásban (T, KBCSc, KMSc)**  
A téma lehet például (a) számítógépes szemléltető program, (b) vizsgáztató program készítése vagy (c) egy-egy tananyag rész internetes feldolgozása, de további lehetőségek is felvethetők. Elsősorban az általános- és középiskolai, másodsorban az egyetemi kémiaoktatásra összpontosítunk. Az (a) és (b) részhez valamilyen programnyelv bizonyos szintű ismerete

szükséges. A (c) ponthoz a honlapkészítés alapjait célszerű ismerni és némi esztétikai érzék sem árt.

**Dr. Rábai Gyula egyetemi tanár:**

▪ **Oszcillációs reakciók kísérleti tanulmányozása (KBSc)**

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.

▪ **Oszcillációs reakciók számítógépes modellezése (KBSc)**

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.