

**Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék**  
**meghirdetett témái a**  
**2018/2019. tanév I. félévére**

**Dr. Baranyai Edina**

(Vegyészmérnök BSc szakdolgozat, 1fő, betelt)

***A mikrohullámú plazma robosztus plazmaparamétereinek vizsgálata***

A viszonylag új atomspektrometriai módszerként 2011-ben megjelent mikrohullámú plazmával kapcsolatban jelenleg kevés szakirodalom áll a rendelkezésre. A magnetron által generált és nitrogénnel fenntartott gerjesztőforrás költséghatékonyabb elemanalízist tesz lehetővé, a mérés során lejátszódó fizikai-kémiai folyamatok azonban eltérnek a hagyományosan alkalmazott induktívan csatolt plazmában fellépő hatásoktól. A kutatás célja a mikrohullámú plazma robosztusságának megállapítása a mérési paraméterek változtatásával, a magnézium ion- és atomvonalán mért modell oldatok segítségével.

(Vegyészmérnök BSc szakdolgozat, 1fő, betelt)

***Gyógyszeripari segédanyagok elemi szennyezőinek vizsgálatára irányuló minta-előkészítési és mérési módszerek fejlesztése***

Az elemi szennyezők az egyes gyártási folyamatok során számtalan forrásból megjelenhetnek a gyógyszerkészítményekben, amelyekre szigorú határértékeket fogalmaznak meg a gyógyszerkönyvi irányelvek. A munka célja a legnagyobb kockázattal rendelkező segédanyagok közül a magnézium-sztearátra vonatkozóan induktívan csatolt plazma technikával mérési módszert optimalizálni, amely a kis koncentrációban megjelenő szennyező elemek megbízható, multielemes analízisét teszi lehetővé.

(Vegyész MSc diplomamunka, 1fő, betelt)

***Fanedvminták kémiai összetételének komplex analitikai vizsgálata, a gyűjtési területek és fajok összehasonlító elemzése***

Az emberi fogyasztás szempontjából is figyelmet kapó xilémnedvek a tavaszi rügyfakadást követően kerülnek begyűjtésre, különböző geológiai adottsággal rendelkező területekről és eltérő fajokhoz tartozó fás szárú növényektől. A minták esszenciális ásványianyag-tartalmának megállapítása mellett a környezeti elemekből (levegő, talaj, víz) esetlegesen bekerülő antropogén és/vagy természetes eredetű szennyező elemek mennyiségi mérése, valamint ezek összehasonlító elemzése a cél. Munkánk során vizsgálni kívánjuk továbbá olyan szerves komponensek jelenlétét is, mint az aminosavak, cukrok és fehérjék.

(Vegyész MSc diplomamunka, 1 fő, betelt)

***Élelmiszerek elemi szennyezőinek kvantitatív vizsgálatára vonatkozó elemanalitikai módszerek fejlesztése***

Az érvényben lévő Európai Unió szabályozások egyre nagyobb hangsúlyt fektetnek az élelmiszerbiztonságra, a „talajtól a tányérig” elv alapján mind a tagállamokban előállított, mind az importált termékek összetételét követhetővé kell tenni és folyamatosan monitorozni. A kutatás célja olyan elemi szennyezők mennyiségi meghatározására vonatkozó elemanalitikai módszerek optimalizálása (FAAS, HG-FAAS, ICP-OES stb.), mint például a ppb koncentrációtartományban határértékkel rendelkező arzén és vegyületei. A teljes elemtartalom megállapításán túl speciációs eljárásokkal az eltérő toxicitácú elemformák szelektív meghatározására is tervezünk méréseket végezni.

(Vegyész MSc diplomamunka, 1 fő, betelt) (Vegyéssz mérnök BSc szakdolgozat, 1 fő, betelt)

***Múmiák (emberi és állati maradványok) kémiai összetételének vizsgálata ICP-OES és FTIR technikákkal***

A mumifikálódott emberi és állati szövetek átfogó analitikai vizsgálatára a magyarországi leletanyagokon eddig korlátozott lehetőségek nyíltak. Egy átfogó elemzést célzó kutatásban most több olyan maradványtöredék is elemzésre kerül, amelyen roncsolásmentes módszerek alkalmazását is engedélyezték. A munka célja gahmudi és váci múmiák csonttöredékeinek és a temetkezésből előkerült egyéb leleteknek az elemanalízise ICP-OES technikával a megfelelő minta-előkészítési technikák optimalizálását követően, valamint szerves komponensek minőségi és mennyiségi felderítése FTIR technika segítségével. Az eredmények az antropológiai munkákat hivatottak támogatni.

**Dr. Bellér Gábor**

(Kémia BSc projekt/szakdolgozat, 2 fő, betelt)

***Fenantrolin-N-oxidok képződésének kinetikája semleges közegben***

A peroxomonoszulfát-ion (a legtöbb oxidálószerrel ellentétben) képes konszekutív lépésekben mono- és di-N-oxiddá oxidálni az 1,10-fenantrolint. Utóbbi képződésére csak a mono-N-oxid deprotonálódását követően van lehetőség, jellemzően semleges vagy lúgos közegben. A munka során szubsztituált fenantrolinok (metil-, klór-, nitroszármazék stb) oxidációjának kinetikai vizsgálata a feladat, elsősorban a di-N-oxidképződésre fókuszálva.

(Vegyéssz mérnök BSc szakdolgozat, 1 fő, betelt)

***Hisztidin oxidációja hidrogén-peroxiddal Cu(II)-ion jelenlétében***

A hisztidin azon aminosavak közé tartozik, mely az oldalláncában is érzékeny az oxidációra, így a szabad aminosav oxidációjának vizsgálatával információk nyerhetők a fehérjékben, peptidekben kötött hisztidin redoxiviselkedéséről is. A H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> fontos biokémiai oxidálószer, mely közvetlenül vagy közvetve (pl. fémion-katalizált módon) is képes oxidálni. A feladat a hisztidin és H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> közötti redoxireakció kinetikai vizsgálata egy vegyértékváltó fémion (Cu(II)-ion) jelenlétében.

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

***Triaza-foszfaadamantán oxidációja peroxomonoszulfát-ionnal***

Az 1,3,5-triaza-7-foszfaadamantánt (PTA) és foszfor-oxidját előszeretettel alkalmazzák a koordinációs kémiában. Az említett ligandumok fémkomplexei nagy népszerűségnek örvendenek a fémorganikus katalízisben. A P-oxidot jellemzően hidrogén-peroxidos oxidációval szokták előállítani. A kutatómunka célja a PTA és egy másik peroxo típusú oxidálószer, a peroxomonoszulfát-ion, közötti reakció kinetikai vizsgálata.

(Vegyésszámológ BSc szakdolgozat, 1fő, betelt)

***Kéntartalmú aminosav-származékok oxidációja peroxotípusú oxidálószerekkel***

A kéntartalmú aminosavakra (metionin és cisztein) különösen jellemző az oldalláncban (a kénatomon) történő oxidáció, mely gyakran megtörténik a kötött aminosavak esetén is. Szisztematikusan változtatva az aminosav-származékok szerkezetét (pl: metionin; glicil-metionin; metionil-glicin összehasonlítása; metionin; S-metil-cisztein összehasonlítása) fontos információk nyerhetők az oxidációs reakciók mechanizmusára vonatkozóan. Minden származékot peroxo típusú oxidálószerekkel ( $H_2O_2$  és  $HSO_5^-$ ) kívánunk oxidálni és minden reakció esetén részletes koncentráció-, pH-, hőmérséklet-, ionerősségfüggést tervezünk.

(Vegyész MSc diplomamunka, 1fő, betelt)

***Hisztidin oxidációja peroxomonoszulfát-ionnal fémion jelenlétében***

A hisztidin azon aminosavak közé tartozik, mely az oldalláncában is érzékeny az oxidációra, így a szabad aminosav oxidációjának vizsgálatával információk nyerhetők a fehérjékben, peptidekben kötött hisztidin redoxiviselkedéséről is. A peroxomonoszulfát-ion (PMS) ugyan (jelen ismereteink szerint) nem fordul elő az élőszervezetben, azonban előszeretettel alkalmazzák más peroxotípusú oxidálószerek (pl.: hidrogén-peroxid) reakcióinak modellezésére. A munka célja a hisztidin és PMS közötti redoxireakció kinetikai vizsgálata vegyértékváltó fémion (pl: Cu(II)-ion) jelenlétében és jelenléte nélkül.

(Vegyész MSc diplomamunka, 2fő, betelt), (Vegyésszámológ BSc szakdolgozat, 1fő, betelt)

***Kéntartalmú aminosav-származékok oxidációja peroxotípusú oxidálószerekkel***

A kéntartalmú aminosavakra (metionin és cisztein) különösen jellemző az oldalláncban (a kénatomon) történő oxidáció, mely gyakran megtörténik a kötött aminosavak esetén is. Szisztematikusan változtatva az aminosav-származékok szerkezetét (pl: metionin; glicil-metionin; metionil-glicin összehasonlítása; metionin; S-metil-cisztein összehasonlítása) fontos információk nyerhetők az oxidációs reakciók mechanizmusára vonatkozóan. Minden származékot peroxo típusú oxidálószerekkel ( $H_2O_2$  és  $HSO_5^-$ ) kívánunk oxidálni és minden reakció esetén részletes koncentráció-, pH-, hőmérséklet-, ionerősségfüggést tervezünk.

**Dr. Fábrián István, Szabó Mária**

(Vegyész MSc diplomamunka, 1fő, betelt)

***A kloriton - hipoklórossav reakció sztöchiometriája, kinetikája és mechanizmusa***

### **Dr. Gáspár Attila**

(Kémia, vegyészmérnök BSc projekt/szakdolgozat 1fő)

***Cukrok meghatározása kapilláris elektroforézissel kapcsolt tömegspektrométerrel***

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

***Klórvegyületek meghatározása kapilláris elektroforézissel kapcsolt tömegspektrométerrel***

(Kémia, vegyészmérnök BSc projekt/szakdolgozat 1fő)

***Sejtek elválasztása izotachoforézissel mikrofluidikai csipben***

### **Kecskeméti Ádám, Dr. Gáspár Attila**

(Kémia, vegyészmérnök BSc projekt/szakdolgozat 1fő)

***Peptidek poszttranszlációs módosításainak vizsgálata de novo peptidszekvenálással***

(Kémia, vegyészmérnök BSc projekt/szakdolgozat 1fő)

***Klinikai minták CE-MS vizsgálata***

(Vegyész MSc diplomamunka, 1fő, betelt)

***Nagy fajlagos felületű enzimreaktorok kifejlesztése polidimetilsziloxánból készült mikrocseppekben***

### **Dr. András Melinda**

(Kémia, vegyészmérnök BSc, OLKDA projekt/szakdolgozat, gyógyszerész diplomamunka 1fő)

***Fehérjék meghatározása kapilláris gélelektroforézissel LED indukált fluoreszcens detektálással***

### **Dr. Lázár István**

(Kémia, vegyészmérnök, BSc projekt, szakdolgozat vagy vegyész/vegyészmérnök MSc diplomamunka, 1fő)

***Mesterséges csontpótlásban használt aerogél kompozitok fluoreszcens jelzési technikájának kidolgozása***

A mesterséges csontpótló anyagokkal kapcsolatban az a gyakorlati kíváncsiságom, hogy a műtéti területen könnyen és szelektíven láthatóak legyenek a beépített anyagok. A téma kidolgozása során olyan anyagot és eljárást kell találni/vizsgálni, amely lehetővé teszi a már előállított kompozitok felületének utólagos fluoreszcens jelzését akár a látható, akár a közeli infravörös (NIR) tartományban.

(Kémia, vegyészmérnök, BSc projekt, szakdolgozat vagy vegyész/vegyészmérnök MSc diplomamunka, 1fő)

***Mesterséges csontpótlásban használt aerogélek előállítására szolgáló szuperkritikus szárítási eljárás kritikus paramétereinek meghatározása***

A mesterséges csontpótló anyagok előállítása szuperkritikus széndioxidos szárítással fejeződik be, azonban a jelenleg használt, többszörös oldószercseréket alkalmazó technológia nagyon időigényes. A téma kidolgozása során a használt oldószerek változtatásával, illetve a szuperkritikus rendszer megfelelő hangolásával a jelenleg használatnál rövidebb, kíméletesebb és lehetőség szerint gazdaságosabb eljárás megtalálása a cél.

(Kémia, vegyészmérnök, BSc projekt, szakdolgozat vagy vegyész/vegyészmérnök MSc diplomamunka, 1fő)

***Fluoreszkáló aerogélek előállítása és optikai szenzorokban történő felhasználásuk vizsgálata***

A ritkaföldfémekkel vagy fluoreszcens részecskékkel dópolt aerogélek és kompozitjaik a szerves fluoreszcens anyagoknál lényegesen magasabb hőmérsékletet és agresszív körülményeket is elviselnek. A téma kidolgozása során olyan aerogélek előállítása, majd pedig vizsgálata a cél, amelyeket a fluoreszcencia kioltása révén magas hőmérsékleten is felhasználhatunk a toxikus gázok, például a fokozottan környezetkárosító nitrozus gázok és kén-dioxid kimutatására.

(Kémia, vegyészmérnök, BSc projekt, szakdolgozat vagy vegyész/vegyészmérnök MSc diplomamunka, 1fő)

***Nanoarany részecskéket tartalmazó szilika aerogélek előállítása, termikus és katalitikus tulajdonságainak vizsgálata***

A nanoarany részecskék, ellentétben a makroszkópiusan inert tömbi arannyal, jelentős katalitikus aktivitással bírnak. A téma kidolgozása során olyan aerogélek előállítása a cél, amelyek aggregációtól mentesen tartalmazzák a nanoarany részecskéket, majd az így előállított nanokompozitok katalitikus aktivitását kell vizsgálni modellvegyületek felhasználásával.

(Kémia, vegyészmérnök, BSc projekt, szakdolgozat vagy vegyész/vegyészmérnök MSc diplomamunka, 1fő)

***Cirkónium-oxid és cirkónia-szilika hibrid aerogélek szintézise, oldódásuk és termikus viselkedésük vizsgálata***

A cirkónium-oxid és a szilika aerogélek is biokompatibilis anyagok, amelyek kísérleti orvosi felhasználására jelenleg is vizsgálatokat végeznek. A cirkónium tartalom miatt az ilyen anyagok lényegesen nagyobb hőmérsékletet elviselésére alkalmasak, mint a tisztán szilika aerogélek. A téma kidolgozása során olyan módszert kell létrehozni, amely segítségével a centiméteres mérettartományban lévő monolitikus darabok állíthatók elő, majd a hőmérséklettől függő zsugorodási/szinterelési tulajdonságaikat és fiziológiás körülmények közötti oldékonyságukat kell meghatározni.

(Kémia, vegyészmérnök, BSc projekt, szakdolgozat vagy vegyész/vegyészmérnök MSc diplomamunka, 1fő)

#### ***Cériumtartalmú aerogélek előállítás és fotokatalitikus aktivitásuk vizsgálata***

A cérium-dioxid fotokatalitikus tulajdonságai kifejezetten felerősödnek, minél kisebb szemcseméretű részecskéket vizsgálunk. A kidolgozandó téma során eljárást kell találni kereskedelmi forgalomból beszerezhető nano-cérium dioxid aggregációjának megakadályozására a szilika aerogélek előállítására alkalmazott körülmények között, létre kell hozni nano-CeO<sub>2</sub> tartalmú aerogéleket, majd modellvegyületek felhasználásával vizsgálni az így kapott anyagok fotokémiai aktivitását.

(Kémia, vegyészmérnök, BSc projekt, szakdolgozat vagy vegyész/vegyészmérnök MSc diplomamunka, 1fő)

#### ***Aerogél tartalmú alakmemória polimer kompozitok előállítása és vizsgálata***

A termikus alakmemóriával rendelkező polimereket ma már egyre szélesebb körben használják a sebészettől a műszaki kutatásokig. A kidolgozandó téma keretében olyan, már a térhálósítás során aerogéleket nagy felületű vendégrészecskéként tartalmazó polimer kompozitok létrehozása, majd szerkezetének SEM vizsgálata, DSC, DMA és alakmemória tulajdonságok meghatározása a cél, amelyek az alap polimerhez képest nagyobb termikus stabilitást és jó alakvisszanyerő képességet mutatnak.

### **Tóth-Győri Enikő, Dr. Lázár István**

(Kémia, vegyészmérnök, BSc projekt, szakdolgozat vagy vegyész/vegyészmérnök MSc diplomamunka, 1fő)

#### ***Szilika aerogél mátrixban immobilizált M(II)-porfirin komplexek katalitikus aktivitásának vizsgálata***

A környezeti szennyezők eltávolítása az élő vizekből nagy problémát jelent az ipar számára. Ráadásul a katalizátorként használt, környezetbe kijutó szabad fémionok szintén terhelést jelentenek a környezetre. A porfirin és származékainak komplexeit széles körben alkalmazzák katalizátorként különböző területeken, ám homogén fázisban való alkalmazásuk hátránya, hogy önoxidációt szenvednek, ami a katalitikus aktivitás elvesztéséhez vezet. A hordozóhoz kapcsolt, heterogén fázisú katalizátorok előnyei a homogén fázisúakhoz képest például: könnyen szeparálhatók a reakcióelegyből, ezen kívül nem olyan érzékenyek az extrém reakciókörülményekre, mint a heterogén fázisú katalizátorok. A hordozókkal szemben támasztott követelmények a kémiai inertesség, a nagy fajlagos felület és a porózus szerkezet. Ezen szempontok alapján a szilika aerogélek ideális katalizátorhordozók lehetnek

(Kémia, vegyészmérnök, BSc projekt, szakdolgozat vagy vegyész/vegyészmérnök MSc diplomamunka, 1fő)

#### ***Kvantumpontokat tartalmazó aerogélek előállítása, jellemzése és fotokatalizátorként történő felhasználhatóságuk feltérképezése***

A félvezető tulajdonságú nanorészecskéket, a kvantumpontokat számos területen alkalmazzák a méretükből adódó különleges tulajdonságaik miatt. Ilyen felhasználási területek például az

optoelektronika, biológiai szenzorok és napelemek fejlesztése, valamint a fotokatalízis. Kutatásunk során ez utóbbi területen való alkalmazhatóságát vizsgáljuk. Az aerogélhez történő kapcsolás célja a kvantumpontok stabilitásának növelése, a reakciókörülményekre való érzékenységük csökkentése.

### **Dr. Kalmár József, Veres Péter, Dr. Forgács Attila**

(Kémia, vegyészmérnök, BSc projekt, szakdolgozat vagy vegyész/vegyészmérnök MSc diplomamunka, 1 fő)

***Szuszpendált pórusos anyagon lejátszódó szorpciós folyamatok kinetikája és mechanizmusa***

(Kémia, vegyészmérnök, biomérnök BSc projekt, szakdolgozat vagy MSc diplomamunka, 1 fő)

***Aerogélek orvosbiológiai alkalmazásai***

(Kémia, vegyészmérnök, BSc projekt, szakdolgozat vagy vegyész/vegyészmérnök MSc diplomamunka, 1 fő)

***Fotofizikai és fotokémiai vizsgálatok villanófény fotolízis technikával***

### **Dr. Lihi Norbert**

(Kémia, vegyészmérnök, BSc projekt, szakdolgozat vagy vegyész/vegyészmérnök MSc diplomamunka, 1 fő)

***Fényérzékeny aminosavak (Tyr, His, Cys és Trp) reakcióinak vizsgálata fénybesugárzás hatására fémionok jelen-, illetve távollétében***

A munka célja különböző fényérzékeny aminosavak fotoindukált reakcióinak vizsgálata. A kellően hosszú élettartamú átmeneti állapotok, illetve a képződő termékek azonosítása. A munka fontos pontja ezen reakciók vizsgálata különböző átmenetifém ionok jelenlétében is.

(Kémia, vegyészmérnök, BSc projekt, szakdolgozat vagy vegyész/vegyészmérnök MSc diplomamunka, 1 fő)

***Réz(II)-komplexek vizsgálata elméleti kémiai módszerekkel***

A munka célja nagyszámú funkcionál és báziskészlet bevonásával réz(II)-komplexek abszorpciós és CD spektrumának minél pontosabb számítása. Ezen túlmenően a rendelkezésre álló idő függvényében az ESR paraméterek számítása (különös tekintettel a hiperfinom csatolási állandóra) is cél.

(Kémia, vegyészmérnök, BSc projekt, szakdolgozat vagy vegyész/vegyészmérnök MSc diplomamunka, 1 fő)

***A  $KO_2$ , mint szuperoxid gyökanyon forrás potenciális felhasználása SOD aktivitás vizsgálatokban stopped-flow időskálán***

A kálium-szuperoxid gyakran használt reagens szuperoxid gyökanyon generálására, ugyanakkor vízben gyorsan bomlik így használata körültekintést igényel. Emiatt a  $KO_2$

tárolására koronaéterek DMSO oldata szolgál. A munka során vizsgáljuk ezen oldat reakcióját vízzel különböző pH-kon, majd reakcióját különböző NiSOD vagy CuZnSOD modellekkel.

### **Dr. Várnagy Katalin**

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

***Oldalláncban imidazol és/vagy tiolcsoportot tartalmazó peptidek komplexképző sajátosságai***

### **Dr. Várnagy Katalin, Lukács Márton**

(vegyészmérnök BSc szakdolgozat, 2 fő, betelt)

***Hisztidintartalmú peptidek réz(II)-komplexei***

### **Dr. Várnagy Katalin, Szunyog Györgyi**

(vegyészmérnök BSc szakdolgozat, 1 fő, betelt)

***Cisztein tartalmú peptidek nikkell(II)-komplexei***

A három téma leírása: A jelenleg gyógyíthatatlan neurodegeneratív betegségek (pl. Alzheimer-kór és prion betegségek) rendkívül komoly egészségügyi és társadalmi problémát jelentek világszerte. Általánosan elfogadottnak tekinthető, hogy egyes fémionok fontos szerepet játszanak ezen megbetegedések kialakulásában és lefolyásában. A betegségekben szerepet játszó fehérjék és fragmenseik koordinációs képességét és fémionszelektivitását elsősorban a molekulában jelenlevő hisztidin és cisztein aminosavak száma és helyzete határozza meg. Így a vizsgálatok célkitűzése annak megállapítása, hogy a peptidek koordinációs képessége és fémkomplexeik stabilitása, szerkezete és redoxi tulajdonságai hogyan szabályozhatók a peptidszekvencián keresztül. A fő vizsgálati módszerek a pH-potenciometria, UV-Vis és CD-spektroszkópia, illetve a ciklikus voltammetria. Az elméleti háttér megértése elsősorban a koordinációs kémia és az oldategyensúlyi analitikai kémia alapjainak ismeretét követeli meg.

### **Prof. Kövér Katalin, Nagy Tamás Milán**

(vegyész MSc diplomamunka)

***Biológiai fontosságú rendezetlen fehérjék peptid modelljeinek vizsgálata NMR-spektroszkópiai módszerekkel és elméleti számításokkal***

A kutatás célja a sejtdifferenciáció szabályozásában szerepet játszó rendezetlen fehérjék in silico tervezett peptid modelljeinek szerkezet-dinamika és biológiai funkció kapcsolatának vizsgálata NMR-spektroszkópiai módszerekkel és elméleti számításokkal.  $^{15}\text{N}$ -jelölt peptid variánsok NMR relaxációs paramétereinek mérése révén vizsgáljuk a dinamika hatását a sejtdifferenciáció folyamatára. Jelöletlen peptidek esetén pedig a rezonanciajelek  $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$  és  $^{15}\text{N}$  kémiai eltolódása alapján történik a dinamika/flexibilitás jellemzése. A kísérleti eredményeket továbbá in silico módszerekkel, molekuladinamikai számításokkal is támogatjuk. A dinamika és a biológiai hatás közti összefüggés elemzése lehetővé teszi a sejtdifferenciációnak peptid-analógokkal történő szabályozását, és ezáltal potenciális gyógyhatású készítmények kifejlesztését.



### **Dr. Fehér Krisztina**

(Kémia, vegyészmérnök BSc projekt/szakdolgozat, 1 fő) (Vegyész, vegyészmérnök MSc diplomamunka, 1 fő)

#### ***Szervetlen nanorészecskék és biomolekulák kölcsönhatásainak komputeres szimulációja***

Szervetlen nanorészecskék gyógyszerhordozóként használhatók rák elleni immun terápiaiban, amelynek során a felszínen kötött biomolekulák biológiai receptorokhoz való eljuttatása a cél. A kutatás során hidroxí-apatit, zirkónia és szilika szilárd formáit jellemezzük irodalmi és adatbázisokbani keresések alapján. Feltérképezzük az elérhető klasszikus és reaktív erőtereket. Megismerjük az AMBER, LAMMPS és ADF szimulációs csomagokat.

(Kémia, vegyészmérnök BSc projekt/szakdolgozat, 1 fő) (Vegyész, vegyészmérnök MSc diplomamunka, 1 fő)

#### ***Egy szálas DNS immunmodulátorok komputeres szimulációja***

A bakteriális eredetű CpG motívumot tartalmazó egyszálú DNS immunmodulánsok a rák elleni immunterápiákban használt adjuvánsok egyik ígéretes csoportja. A kutatás során felmérjük az egy szálas DNS molekulák szerkezeti sajátosságait és molekula dinamikai szimulációinak lehetőségeit irodalmi források alapján.

### **Dr. Buglyó Péter, Kozsup Máté**

(vegyészmérnök BSc szakdolgozat)

#### ***Flavonoláto ligandumú Co(III) komplexek előállítása és vizsgálata***

### **Dr. Buglyó Péter, Ozsváth András**

(vegyész MSc diplomamunka)

#### ***Peptidkonjugátumok fémkomplexeinek előállítása és vizsgálata***

### **Dr. Buglyó Péter, Nagy Sándor**

(vegyész MSc diplomamunka)

#### ***[Co(N,N)(N,N)(O,O)] típusú várhatóan hipoxia-aktivált komplexek szintézise és vizsgálata***

### **Dr. Kállay Csilla**

(Kémia Bsc projekt, 1 fő, betelt)

#### ***A réz(II)ion kölcsönhatása aprion protein kötőhelyeit modellező oktapeptiddel***

## Dr. Dávid Ágnes

(kémia tanári szakdolgozat, 1 fő, betelt)

### ***A differenciált kémiatanítás megvalósítása QR-kódokkal bővített segédanyagok fejlesztésével az általános kémia témaköreiben***

A (kémia)tanítás során igen komplex feladat az, hogy a tanított közösség legtöbbször nagyon heterogén céljait, felkészültségüket, kulturális környezetüket, stb. tekintve, így nehéz olyan órákat tartani, hogy minden diák a számára legjobb tematikában és szemléletben tudja a kémiát megtanulni, megérteni. A QR-kódokkal támogatott segédanyagok lehetőséget adnak arra, hogy mélyítsük és bővítsük, illetve differenciáljuk az adott ismeretanyagokat.

(kémia tanári szakdolgozat, 1 fő, betelt)

### ***Kísérletek gyűjtése és tervezése köznapi anyagokkal***

A kémiatanítás célja többek között a minket körülvevő világ anyagainak megismerése, kölcsönhatásainak értelmezése. A hagyományos szemléletű kémiatankönyvekben ritkán szerepelnek olyan kísérletek, melyek köznapi anyagok vizsgálatán alapulnának, így azonban a kémiát tovább nem tanulók számára ezek a kísérletek nem kötődnek majd például a hypo, a lúgos vizek vagy a kénes szappan hatásának értelmezéséhez. A diplomamunka keretében ilyen életszerű jelenségekhez kapcsolódó kísérleteket keresünk vagy fejlesztünk.

(kémia tanári szakdolgozat, 1 fő)

### ***A tanulókat motiváló, életszerű számítási feladatok gyűjtése és tervezése***

A kémiai számítások gyakorta a kémia legnehezebb részét jelentik a diákok számára. A tanulók zömében túl absztraktnak, a valósághoz alig kapcsolódónak és sterilnek érzik azokat. A számítások során fontos elv, hogy igyekezzünk életszerűvé tenni azokat. A téma keretében ilyen feladatokat tervez a jelentkező.

(kémia tanári szakdolgozat, 1 fő)

### ***Blogok a természettudományos és kémiaoktatásban: Hiteles és nem hiteles tartalmak webes felületeken***

A web 2.0. korában a diákok, tanárok már nem csak fogyasztói, hanem tartalom készítői is lehetnek. Számos blog, vlog, honlap stb. szolgáltat információt, ad segítséget, köti össze a tanárokat, szülőket és tanulókat, de éppen a nyitottsága miatt ellenőrizetlen információival félrevezető és megtévesztő is lehet. A jelentkezőnek alkalma nyílik ezek megismerésére és értékelésére.

(kémia tanári szakdolgozat, 1 fő)

### ***Irodalmazási téma: Más tárgyak szakmódszertanának összehasonlító vizsgálata, valamint az eredmények hasznosíthatóságának vizsgálata a kémia tanításának szakmódszertanában***

A kétszakos tanárjelöltek is gyakran tapasztalják, hogy milyen különböző is tantárgyaik szakmódszertana. Egy másik tantárgy tanítása során alkalmazható módszerek, legfrissebb módszertani kutatási eredmények azonban gondolatébresztőek is lehetnek. A téma keretében a jelentkező ilyen átültetési pontokat, kapcsolatokat térképezze föl.

(kémia tanári szakdolgozat, 1fő)

***Interneten elérhető kémiai oktatóvideók gyűjtése, kritikája, valamint új videók készítése és azok hatékonyságának elővizsgálatai***

Az interneten, illetve különböző tartalommegosztó csatornákon gyakorta találkozhatnak a tanulók különböző kémiai tárgyú oktatóvideókkal, melyek szakmai színvonala esetenként megkérdőjelezhető. A jelentkező egyrészt ilyenek gyűjtésével és értékelésével foglalkozik, valamint maga is készít segédanyagokat. A saját készítésű videókat különböző oktatási közegekben is kipróbálja, majd elővizsgálatokat végez annak jelzésére, hogy ez az oktatási forma mennyiben és milyen formában lehetne valódi segítség olyan diákok számára is, akik nem jutnak hozzá a rendszeres, magas színvonalú kémiaoktatáshoz.

(kémia-idegen nyelv tanári szakdolgozat, 1fő)

***A kéttannyelvű kémiaoktatás vizsgálata a kémiai fogalmak kialakításával kapcsolatos problémák szempontjából***

A kémia tanulása során többek között jelentős nehézséget okoz a diákok számára annak szaknyelve. A tanulóknak a köznapi szóhasználathoz képest szinte egy új szótárat kell felépíteniük, a szakirodalomban ezért a természettudományok tanításának problémáit az idegen nyelv tanulásának problémáihoz kötötték (Prophet és Towse, 1999). A kémiai fogalmak tudományos és köznapi jelentésének eltérése, kontextusfüggő jelentése, valamint három értelmezési szintjének helyes összekapcsolása (szimbólumok szintje; definíciók, fogalmak szintje; törvények, modellek szintje) ugyancsak nehezíti a kémiai jelenségek magyarázatát és megértését. A jelentkező a fogalmak kialakítása során a már ismert nyelvi nehézségeket vizsgálja a kéttannyelvű oktatásban.

**Dr. Tóth Imre**

(vegyész MSc diplomamunka, 1fő, betelt)

***Elemeloszlás vizsgálata biológiai mintákban lézer-ablációs ICP-MS módszerrel***

Az orvosi képalkotás több módszere használ fémkomplexeket magának a képnek a generálásához (SPECT, PET, optikai módszerek), vagy a kép kontrasztosságának javításához (MRI). A fémionokat megfelelően stabilis és inert fémkomplexeket alkotó ligandumokkal juttatják az élő szervezetbe, ahonnan ideális esetben maradéktalanul ki kell ürülnie azoknak, elkerülendő a toxikus mellékhatásokat. A fémkomplexek eloszlását, esetleges bomlástermékeik kémiai formáját érzékeny analitikai módszerekkel vizsgálják. Ezen vizsgálatok továbbfejlesztését jelentheti a lézer-ablációs mintavétellel kombinált ICP-MS technika, ami maga is nagy felbontású, háromdimenziós elemterképet eredményez. A vizsgálandó fémek elsősorban a gadolínium és a mangán (MRI kontrasztanyagok) lesznek, míg a biológiai minták kísérleti egerek csont ill. szív-metszetei, esetleg emberi vészsérum lehetnek.

A hallgatónak a kémiai elemzések jelentik a fő feladatát, de közre kell működni a biológiai minták kezelésében is. A kísérleti munkát részben a Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszéken, részben az ATOMKI-ban kell végezni.

## **Dr. Gyémánt Gyöngyi**

(vegyész MSc diplomamunka, 1 fő, betelt)

***Igazolt biológiai hatással bíró növényi kivonatok komponenseinek MALDI MS elemzése***

(vegyész MSc diplomamunka, 1 fő, betelt)

***Glikoenzimek aktivitás mérése biológiai mintákból***

(vegyész MSc diplomamunka, 1 fő, betelt)

***Glikáció vizsgálata HPLC módszerrel***

## **RITKAFÖLDFÉM kutatócsoport**

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.

## **Dr. Tircsó Gyula**

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

***$\text{Mn}^{2+}$ -komplexek egyensúlyi,  $^1\text{H}$ -relaxometriás és kinetikai jellemzése.***

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

***Cink(II)ion koncentrációjára érzékeny kontrasztanyagok modellvegyületeinek egyensúlyi oldategyensúlyi jellemzése.***

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

***Fémion alapú PET (Pozitron Emissziós Tomográfia) diagnosztikumok előállítása, egyensúlyi és kinetikai jellemzése.***

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

*Mn<sup>2+</sup>-alapú intelligens MRI kontrasztanyagok előállítása és jellemezése.*

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

*Új bifunkciós ligandumok tervezése, előállítása és kétvegyértékű fémionokkal képződő komplexeik koordinációs kémiai jellemzése.*

(vegyész MSc , gyógyszerész diplomamunka, 1 fő, betelt)

*Fe<sup>2+</sup>-alapú intelligens MRI kontrasztanyagok előállítása és jellemezése.*

(vegyész MSc , gyógyszerész diplomamunka, 1 fő)

*Mn<sup>2+</sup>-alapú intelligens MRI kontrasztanyagok előállítása és jellemezése.*

### **Dr. Tircsó Gyula, Garda Zoltán**

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

*Ni<sup>2+</sup>-ion alapú ParaCEST kontrasztanyag-jelöltek előállítása és jellemzése*

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

*Makrociklusos ligandumokkal képződő Co<sup>2+</sup>-komplexek előállítása és jellemzése.*

### **Dr. Tircsó Gyula, Csupász Tibor**

(projekt/szakdolgozat kémia/vegyészmérnök BSc, 2 fő, betelt)

*Új, makrociklusban oxigénatomot is tartalmazó makrociklusos ligandumok előállítása és kétvegyértékű fémionokkal képződő komplexeik jellemzése.*

### **Dr. Tircsó Gyula, Molnár Enikő**

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

*Bifunkciós ligandumok fémkomplexeinek koordinációs kémiai jellemzése.*