

A Fizikai Kémiai Tanszék 2016/17 tanévre meghirdetett projekt, szakdolgozat és diplomamunka témái

A megadott témákkal kapcsolatban keressék a megjelölt témavezetőt további információkért!
A megadott témákra jelentkezni személyesen szükséges!

Porózus anyagok vizsgálata NMR technikákkal (BSc projekt/szakdolgozat, 2 fő)

Különböző lágy és kemény anyagok pórusméret-eloszlásának és a pórusok alakjának meghatározása krioporozimetriás módszerrel. A pórusok nedvesíthetőségének és a porózus szerkezet kialakulásának vizsgálata folyékony közegben pórusos katalizátorok, szerves aerogélek és szén aerogélek esetén, relaxometriás és diffúziometriás módszerrel. A téma felvételéhez szükséges az NMR operátorképzés tantárgy korábbi teljesítése.

Témavezető: Dr. Kéri Mónika, Dr. Bányai István

Makromolekulák hidratációjának vizsgálata (BSc projekt/szakdolgozat, 2 fő) (betöltve), (MSc diplomamunka, 1 fő)

A makromolekulák hidratációja alkalmazásuk szempontjából igen fontos. Kiszélesítésű NMR relaxometriás és diffúziometriás mérésekkel nem csak a hidratációs számról, de a hidratáció mechanizmusáról, a makromolekulák hidrophil és hidrophób karakteréről is információ nyerhető. Ezeknek az információknak a fizikai-kémiai tartalma, jelentése erősen módszerfüggő, így az eredményeink egyéb adatokkal összevetve segíthetik a kiszélesítésű NMR további alkalmazásait.

Témavezető: Dr. Bányai István

Fémkomplexek képződése makromolekulás ligandumokkal (MSc diplomamunka, 1 fő)

A makromolekulás ligandumok fémkomplexeinek a szerepe nagy a mindennapi életben. Az esetek többségében egy makromolekula, csak néhány (kis egész számú) fémiont köt meg. Ha ennél több funkció csoport rajta (benne), akkor sok fémion is megkötődhet egy makromolekulán. Ilyenek az ember által mesterségesen előállított polimerek. Ezek komplexképződési folyamatainak jellemzése és modellezése a cél.

Témavezető: Dr. Bányai István

Szénalapú nanorészecskék előállítása és felületi sajátosságának vizsgálata (BSc projekt/szakdolgozat, 2 fő)

A mesterségesen előállított, különböző szénalapú nanorészecskék (grafén, grafén-oxid, karbon nanocsövek és nanoszövetek) tulajdonságát és felhasználhatóságát nagymértékben befolyásolja a felületen található aktív helyek és funkció csoportok minősége és mennyisége. Különböző kolloidkémiai és spektroszkópiai módszerekkel próbáljuk feltérképezni ezen nanorészecskék felszínét.

Témavezető: Dr. Nagy Zoltán

Amid kötés kialakítása termikus reakcióval poláros aprotikus közegben (MSc diplomamunka, 1 fő)

A karboxil- és amincsoportok között kondenzációval létrejött amid kötés nagy jelentőséggel bír a szerves makromolekulák felépítésénél 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.

Témavezető: Dr. Novák Levente

Funkcionalizált makromolekulák szintézise és jellemzése (BSc projekt/szakedolgozat, 2 fő), (MSc diplomamunka, 2 fő)

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.

Témavezető: Dr. Novák Levente

Környezetszennyező fémionok és kőzetek kölcsönhatásai

A környezetszennyező fémionok megkötődése kőzeteken és talajokon meghatározza azok oldhatóságát és a növény által történő dúsulását, a táplálékláncba történő bekerülését. A kölcsönhatások kinetikájának és termodinamikai paramétereinek ismerete fontos tényező a fenti folyamatokban, valamint a szennyezett területek dekontaminálásában. A téma kidolgozása során környezetszennyező fémionok megkötődését, deszorpcióját vizsgáljuk különböző, a földtani képződményekre jellemző körülmények között, ill. a tanulmányozzuk megkötődést befolyásoló kémiai állapotokat.

Témavezető: Dr. M. Nagy Noémi

Diffúziós és adszorpciós vizsgálatok természetes kőzetekben és betonmintákban radioizotópos nyomjelzéssel

A kis és közepes aktivitású radioaktív hulladékok földalatti tárolásánál agyagkőzeteket és betont használnak mérnöki gátként, a természetes gátat pedig a környező földtani képződmények (kőzetek) képzik. A biztonságos hulladéktárolás fontos feltétele, hogy ezek a gátak megakadályozzák a radioaktív izotópok szétterjedését a környezetben. A szétterjedés mértékét a vízmozgás és az izotópok megkötődése együtt határozza meg. A téma kidolgozása során migrációs és adszorpciós vizsgálatok történnek.

Témavezető: Dr. M. Nagy Noémi

Talajok foszfortápanyag-ellátottságának vizsgálata radioaktív nyomjelzéssel

Heterogén izotópcserével 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.

Témavezető: Dr. M. Nagy Noémi

The determination of water-soluble phosphate content of soil by radioactive tracer method

The ratio of water soluble/exchangeable to mineralized/organic phosphate after incubation of the soil with different phosphate quantities is studied by $^{32}\text{PO}_4^{3-}$ radiotracer. The transport rate of phosphorous between the soil and the solution is determined in a steady-state. The radioisotopic tracer method is a unique method to measure these important characteristics of plant nutrition and fertilization.

The student can collect the soil sample in his/her country.

Supervisor: Dr. Noémi M. Nagy

Átmenetifém komplexek szerkezetének vizsgálata egykristály röntgendiffrakcióval (MSc diplomamunka)

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

Témavezető: Dr. Béneyi Attila

Folytonos szimmetria mérték hidrogén hidas szerkezetek összehasonlításában (BSc projekt/szakdolgozat)

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

Témavezető: Dr. Béneyi Attila

Szerkezet meghatározása pordiffrakciós adatokból (BSc projekt/szakdolgozat)

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.

Témavezető: Dr. Béneyi Attila

Krisztallográfiai adatbázisok használata, molekulacsaldok összehasonlítása (BSc projekt/szakdolgozat)

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

Témavezető: Dr. Béneyi Attila

PETN-reduktáz homológjai röntgendiffrakciós szerkezeteinek összehasonlító elemzése (MSc diplomamunka)

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.

Témavezető: Dr. Béneyi Attila

PETN-reduktáz röntgendiffrakciós szerkezetének meghatározása, finomítása (MSc diplomamunka)

A feladat egy pentaeritrol-trinitrát reduktáz enzim röntgendiffrakciós szerkezetének finomítása szinkrotron méréssel készült adatkészlet felhasználásával.

Témavezető: Dr. Béneyi Attila

Study of solid state structures of transition metal complexes determined by single crystal X-ray diffraction

Basic use of software packages to solve and refine small molecular structures from single crystal X-ray diffraction data.

Supervisor: Dr. Attila Béneyi

Use of crystallographic database to compare solid state structure of organic molecules

Search of Cambridge Structural Database and comparison of a given molecule family.

Supervisor: Dr. Attila Béneyi