

A Fizikai Kémiai Tanszék 2017/2018. tanév I. félévére kiírt projektmunka, szakdolgozati és diplomamunka témakörei

Bányai István:

- **Makromolekulás fémkomplexek képződés reakciónak kinetikája:** *Funkcionalizált polietilén-iminek komplexképződésének vizsgálata Ce³⁺-ionokkal spektrofotometriás módszerrel. A reakció mechanizmusának felderítése és a makromolekulás kontrasztanyagok kinetika viselkedésének modellezése.* (1 MSc diplomamunka, van rá jelentkező)
- **Amfifil molekulák hidratációjának vizsgálata:** *Nemionos amfifil molekulák tömény oldatait gyakorta használják a fehérjék szerkezetvizsgálatában. A kölcsönhatásuk vízzel és tömény vizes rendszereknek viselkedése fontos információ a szerkezetkutatásban. Az NMR-relaxomeria és diffuziometria olyan információkat szolgáltat, amelyek más módszerekkel nem érhetők el. A kísérleteket szójalecitinnel kezdjük, majd egyéb foszfatidil kolinokkal folytatjuk.* (1 MSc diplomamunka, van rá jelentkező)

Bányai István és Kéri Mónika:

- **Porózus anyagok vizsgálata NMR technikákkal:** *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 diffuziometriás módszerrel. A téma felvételéhez szükséges az NMR operátorképzés tantárgy korábbi teljesítése.* (1 fő vegyészmérnök/kémia BSc projekt/szakdolgozat)

Bényei Attila:

- **Átmenetifém komplexek szerkezetének vizsgálata egykristály röntgendiffrakcióval:** *A feladat az egykristály röntgen diffrakciós szerkezet meghatározáshoz használt alapvető programok megismerése, néhány szerkezet megoldása és finomítása.* (vegyész vagy vegyészmérnök MSc diplomamunka, kémia BSc projektmunka vagy szakdolgozat, vegyészmérnök BSc szakdolgozat, 1 fő, 1 szabad hely)
- **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.* (chemical engineering BA, chemistry MA, 1 person, 1 free)
- **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 vagy vegyészmérnök MSc diplomamunka, kémia BSc projektmunka vagy szakdolgozat, vegyészmérnök BSc szakdolgozat, 1 fő, 1 szabad hely)

- **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 vagy vegyészmérnök MSc diplomamunka, kémia BSc projektmunka vagy szakdolgozat, vegyészmérnök BSc szakdolgozat, 1 fő, 1 szabad hely)
- **Krisztallográfiai adatbázisok használata, molekulacsaládok összehasonlítása:** *Egy megadott molekulacsalád krisztallográfiai adatbázisban való keresése és a szerkezetek összehasonlítása.* (vegyész vagy vegyészmérnök MSc diplomamunka, kémia BSc projektmunka vagy szakdolgozat, vegyészmérnök BSc szakdolgozat, 1 fő, 1 szabad hely)
- **Use of crystallographic database to compare solid state structure of organic molecules:** Search of Cambridge Structural Database and comparison of a given molecule family. (chemical engineering BA, chemistry MA, 1 person, 1 free)
- **PETN-reduktáz homológjai röntgendiffrakciós szerkezeteinek összehasonlító elemzése** *A pentaeritrol-trinitrát reduktáz enzim lényeges szerepet játszik a trinitrotoluol biológiai lebomlásában. A feladat különböző szubsztrátum molekulákkal képezett komplexek, illetve a hasonló enzimek szerkezetének összehasonlítása.* (vegyész vagy vegyészmérnök MSc diplomamunka, kémia BSc projektmunka vagy szakdolgozat, vegyészmérnök BSc szakdolgozat, 1 fő, 1 szabad hely)

Kathó Ágnes és Udvardy Antal:

- **C-C kötés kialakítása vízdoldható Pd(II)-szulfoszalán komplexekkel** (kémia BSc, projektmunka vagy szakdolgozat, 1 fő, 1 szabad hely)
- **Foszfaurotropinokat tartalmazó, vízdoldható Ir-komplexek katalitikus alkalmazásai** (vegyész MSc, 1 fő, nincs szabad hely)
- **H-átviteli reakciók vízdoldható Ir-katalizátorokkal** (kémia BSc projektmunka, 1 fő, nincs szabad hely)
- **Új átmenetifém-komplexek előállítása vízdoldható foszfinok által alkotott ionpárok felhasználásával** (kémia BSc, projektmunka vagy szakdolgozat, 1 fő, 1 szabad hely)

M. Nagy Noémi:

- **Radioaktív anionok megkötése módosított agyagkőzeten:** *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 módosítani, hogy azok a radioaktív anionokat is megkötse. A munka során ezeket a módosítási lehetőségeket, illetve anionos jellegű radionuklidok megkötését vizsgáljuk.* (vegyész vagy vegyészmérnök MSc diplomamunka, kémia BSc projektmunka vagy szakdolgozat, vegyészmérnök BSc szakdolgozat, 2 fő, 1 szabad hely)
- **Talajok foszfortápanyag-ellátottságának vizsgálata radioaktív nyomjelzéssel** (vegyész MSc, 1 fő, nincs szabad hely)
- **Foszfátion megkötődése és deszorpciója háromértékű kationcserélt bentoniton** (vegyészmérnök BSc, 1 fő, nincs szabad hely)

Nagy Zoltán:

- **Szénalapú nanorészecskék felületi sajátosságának vizsgálata:** *A mesterségesen előállított, különböző szénalapú nanorészecskék (grafén, grafén-oxid, karbon nanocsövek és nanoszövetek) tulajdonságát és felhasználhatóságát nagymértékben befolyásolja a felületen található aktív helyek és funkciós csoportok minősége és mennyisége. Különböző kolloidkémiai és spektroszkópiai módszerekkel próbáljuk feltérképezni ezen nanorészecskék felszínét.* (kémia BSc projekt vagy szakdolgozat, 1 fő, 1 szabad hely)

Novák Levente:

- **Amid kötés kialakítása termikus reakcióval poláros aprotikus közegben:** *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.* (MSc diplomamunka, 1 fő, 1 szabad hely)
- **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 funkcionizált 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/szakdolgozat, 1 fő, 1 szabad hely), (MSc diplomamunka, 1 fő, nincs szabad hely)

- **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 detektálás érzékenységének vagy az elválasztás hatékonyságának jelentős növelésére. A projektmunka/szakdolgozat 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/szakdolgozat, 1 fő, 1 szabad hely)

Ősz Katalin:

- **A Ce(III) által katalizált fotokémiai vízbontás kinetikája** (vegyészmérnök BSc, 1 fő, nincs szabad hely)