

## **Fizikai Kémiai Tanszék meghirdetett témái a 2017/2018. tanév II. félévére**

**Dr. Béneyi Attila**

(vegyész/ vegyészmérnök MSc diplomamunka, kémia/vegyészmérnök BSc projektmunka vagy szakdolgozat, 1 fő)

### ***Átmenetifém komplexek szerkezetének vizsgálata egykristály röntgendiffrakcióval***

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

(chemical engineering BA, chemistry MA, 1 person)

### ***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.

(vegyész/ vegyészmérnök MSc diplomamunka, kémia/vegyészmérnök BSc projektmunka vagy szakdolgozat, 1 fő)

### ***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/ vegyészmérnök MSc diplomamunka, kémia/vegyészmérnök BSc projektmunka vagy szakdolgozat, 1 fő)

### ***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/ vegyészmérnök MSc diplomamunka, kémia/vegyészmérnök BSc projektmunka vagy szakdolgozat, 1 fő)

### ***Krisztallográfiai adatbázisok használata, molekulacsaládok összehasonlítása***

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

(chemical engineering BA, chemistry MA, 1 person)

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

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

(vegyész/ vegyészmérnök MSc diplomamunka, kémia/vegyészmérnök BSc projektmunka vagy szakdolgozat, 1 fő)

***PETN-reduktáz homológjai röntgendiffrakciós szerkezeteinek összehasonlító elemzése***

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.

**Gombos Réka**

(kémia BSc projektmunka vagy szakdolgozat, vegyészmérnök BSc szakdolgozat, 1 fő)

***Pd-szalán komplex alkalmazása modellmembránok hidrogénezési reakcióiban***

A sejtmembránok fluiditása hatással van a membránhoz kötött folyamatokra, mint pl. a transzport folyamatokra, az enzimaktivitások megváltozására, vagy a HSP (Heat Shock Protein) fehérjék termelődésére. A membrán fluiditását több tényező befolyásolja, ilyen pl. a hőmérséklet, vagy a membránban található lipidek telítettségi foka – minél több telített lipidet tartalmaz a membrán, annál „keményebb”. Ennek következménye, hogy a membránok lipidjeinek hidrogénezésével képesek vagyunk a membránok fluiditását befolyásolni. Célunk a Pd-szalán katalizátor alkalmazása modellvegyületek (telítetlen aldehidek és ketonok), és liposzóma mint modellmembrán hidrogénezési reakcióiban.

**Dr. M. Nagy Noémi:**

(vegyész vagy vegyészmérnök MSc diplomamunka, kémia BSc projektmunka vagy szakdolgozat, vegyészmérnök BSc szakdolgozat, 2 fő, 1 szabad hely)

***Radioaktív anionok megkötése módosított agyagkőzetben***

A nukleáris hulladék föld alatti tárolása során fontos szempont a radioanuklidok 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 megkössék. A munka során ezeket a módosítási lehetőségeket, illetve anionos jellegű radionuklidok megkötését vizsgáljuk.

(vegyész és vegyészmérnök MSc diplomamunka, 1 fő)

**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. (A munkák szezonális jellege miatt olyan hallgató jelentkezését várjuk, aki április, június és július hónapban hosszabb időt tud szánni a kísérleti munkára.)

(vegyész vagy vegyészmérnök MSc diplomamunka, kémia BSc projektmunka vagy szakdolgozat, vegyészmérnök BSc szakdolgozat, 2 fő, 1 szabad hely)

### ***Fémionok és kőzetek kölcsönhatásai***

A 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, valamint a megkötődés hatására lejátszódó esetleges szerkezeti változásokat

## **Dr. Nagy Zoltán**

(Szakdolgozat, kémia/vegyészmérnök BSc 1 fő, van rá jelentkező)

### ***Különböző moláris tömegű polimerek megkülönböztetése NMR segítségével***

Az NMR spektrumban egymással átfedő jeleket adó vegyületek megkülönböztetése meglehetősen nehézkes, mennyiségi és minőségi információkat kinyerni a mérési adatokból önmagában nem lehetséges. NMR diffúziós és relaxációs módszerek segítségével – méretstandard polimerek felhasználásával – minőségi és mennyiségi elemzést kívánunk végezni vizes polimeroldatokon. Az eredmények felhasználásával gyógyszerformulák elemzését kívánjuk elvégezni.

(Szakdolgozat, kémia/vegyészmérnök BSc 1 fő, van rá jelentkező)

### ***Nanoformulázott gyógyszerforma szerkezeti vizsgálata***

A vízoldhatatlan hatóanyagú gyógyszerek jobb biohasznosulását gyakran nanoformulázással oldják meg. Az eljárás hatékonyságát, valamint a keletkező nanorészecske szerkezetét, stabilitását és hatóanyag leadási képességét többféle módszerrel vizsgálják. Jelen kísérletben 1 és 2 dimenziós NMR módszereket vetünk be a szerkezet felderítésére.

(Szakdolgozat, kémia/vegyészmérnök BSc 1 fő, van rá jelentkező)

### ***Az albumin és antitest közötti kölcsönhatás tanulmányozása specifikusan kötődő festékmolekulák jelenlétében***

A vérszérum és egyéb szöveti folyadékok fehérjeanalízisét megnehezíti, ha a mintában nagy koncentrációban jelen van egy olyan komponens, amely a többi részecske elemzését gátolja. Az albumin egy ilyen fehérje a szérumban, melynek koncentrációját szelektíven csökkenthetjük, ha annak antitestjét immobilizáljuk egy szilárd hordozón, és ez utóbbit mint kolonnátöltetet alkalmazzuk. Az elválasztás bár működik a kolonna regenerálása az erős antigén-antitest kölcsönhatás miatt eddig nem volt biztosított. Kísérleteink során az albuminhoz specifikusan kötődő festékmolekulákkal próbáljuk megbontani a rendkívül stabil komplexet.

**Dr. Papp Gábor**

(vegyészmérnök MSc diplomamunka, 1 fő, van rá jelentkező)

*Szén-dioxid homogénkatalitikus redukciója vizes közegben*

**Dr. Purgel Mihály:**

(vegyész MSc diplomamunka, 1 fő)

*Palládium-szalán komplexek katalitikus aktivitásának vizsgálata kvantumkémiai módszerekkel*

A palládium(II)-szalán komplex és annak származékai hatékony katalizátorai számos reakciónak. Célunk azok reakciómechanizmusainak felderítése kvantumkémiai módszerekkel.