

Kémia BSc szakos hallgatók részére szakdolgozati témakinálat

Téma címe	Oktató	Ajánlott szak, szakirány	Típus	Előfeltétel
Analitikai Kémiai Tanszék				
Membránok tulajdonságainak vizsgálata NMR spektroszkópiával	Bodor Andrea	Kémia BSc, Vegyész szak		
NMR módszerek a kismolekulák (hatóanyagok, peptidek) és makromolekulák (fehérjék) kölcsönhatásának vizsgálatában	Bodor Andrea			
A kémiai analitika szerepe az élelmiszer hamisítások fő	Eke Zsuzsanna			
A beltéri levegő szerves szennyezőivel kapcsolatos sz	Eke Zsuzsanna			
A Mössbauer-spektroszkópia és alkalmazása ásványok vizsgálatára.	Homonnay Zoltán			
Mössbauer spektroszkópia és alkalmazása a vas koordinációs kémiájában	Homonnay Zoltán			
Természetes és mesterséges hormonok élettani hatása(i); kromatográfiás elemzésük módszerei; azonosításuk és mennyiségi meghatározásuk GC-MS(MS) eljárással, trimetilszilil (oxim) éterekként, környezeti vízmintákban.	Perl Miklósné dr.			
Alkil-fenolok és etoxilátjaik élettani hatása(i); kromatográfiás elemzésük módszerei; azonosításuk és mennyiségi meghatározásuk GC-MS(MS) eljárással, származék-készítés nélkül, valamint, trimetilszilil (oxim) éterekként, környezeti vízmintákban.	Perl Miklósné dr.			
Biocid típusú-szennyezők (2-methyl-3-izotiazolon, 5-chloro-2-methyl-3-izotiazolon, 1,2-benzo-izotiazolon, 2-oktil-3-izotiazolon, 4,5-dikoloro-2-oktil-3-izotiazolon) élettani hatása(i); kromatográfiás elemzésük módszerei; azonosításuk és mennyiségi meghatározásuk GC-MS eljárással, trimetilszilil (oxim) éterekként, környezeti vízmintákban.	Perl Miklósné dr.			

Elvezeti drogok elemzésének módszerei; azonosításuk és mennyiségi meghatározásuk GC-MS(MS) eljárással, származék-készítés nélkül, valamint, trimetilszilil (oxim) éterekként, környezeti vízmintákban.	Perl Miklósné dr.			
A ketocsoportú szerves szennyezők elemzésének módszerei, azonosításuk és mennyiségi meghatározásuk, GC-MS(MS) eljárással, származék-készítés nélkül, valamint, trimetilszilil (oxim, vagy és hidrazon) éterekként, környezeti vízmintákban.	Perl Miklósné dr.			
Fitoesztrogenek elemzésének módszerei; azonosításuk és mennyiségi meghatározásuk GC-MS(MS) eljárással, származék-készítés nélkül, valamint, trimetilszilil (oxim) éterekként, a növényvilágban, valamint környezeti vízmintákban.	Perl Miklósné dr.			
Új aeroszol részecskék képződése és növekedése	Salma Imre			
Az ultrafinom légköri aeroszol Budapest különböző helyszínein	Salma Imre			
Az ultrafinom aeroszol részecskék kiülepedése az emberi légzőrendszerben	Salma Imre			
Nagy porozitású alumínium-oxid-hidroxid rendszerek kialakítása és szerkezetvizsgálata	Sinkó Katalin			
Bioaktív kerámiák szol-gél szintézise és szerkezetvizsgálata	Sinkó Katalin			
Fémoxid-alapú nanoporok új típusú oldatfázisú előállítása	Sinkó Katalin			
Hidrogénionra autokatalitikus reakció-diffúzió rendszerek vizsgálata	Szalai István			
Oscilláló mikrogélek előállítása és vizsgálata	Szalai István – Varga Imre (Fizikai Kémiai Tsz)			

Fizikai Kémiai Tanszék

Molekuláris káosz demonstrálása egyszerű számítógépes modelleken	Baranyai András			elemi programozási ismeretek szükségesek
Transzport együtthatók számítása egyszerű fluidumokban	Baranyai András			elemi programozási ismeretek szükségesek
Termodinamika oktatása középiskolások számára	Baranyai András			
Vizsgálatok a vízmolekula klasszikus modelljével	Baranyai András			
Folyékony Ag-Al-Sn ötvözet elegyedési termodinamikai sajátságainak meghatározása Knudsen-effúziós tömegspektrometriával.	Bencze László			A szükséges vizsgák és laborgyakorlatok fizikai-kémiából
Folyékony Cu-Sb-Sn és Ag-Sb-Sn ötvözetek elegyedési termodinamikai sajátságainak meghatározása Knudsen-effúziós tömegspektrometriával	Bencze László			kémiából
Számítógépes molekuláspektroszkópia	Császár Attila	Kémia BSc, vegyész MSc	számítógépes kutatás	Elméleti kémia, programozási alapismeretek
Aktív adatbázisok építése és használata	Császár Attila	Kémia BSc, vegyész MSc		Elméleti kémia
Spektroszkópiai hálózatok	Császár Attila	Kémia BSc, vegyész MSc		
Ionos tenzid szabadfelszíni adszorpciójának vizsgálata	Gilányi Tibor	Kémia BSc		Előfeltétel: Kolloidikából érvényes vizsga
Elektroszorpciós folyamatok tanulmányozása kvarckristály-nanomérleggel	Inzelt György			
Vezető polimerek előállítása elektropolimerizációval és vizsgálatuk	Inzelt György			
Tüzelőanyag-cellákban lejátszódó folyamatok vizsgálata	Inzelt György			

Femtosekundum időfelbontású kinetikai mérések dekonvolúciója genetikus algoritmus segítségével	Keszei Ernő			
Biokompatibilis gyógyszerhordozók fejlesztése	Kiss Éva			
Bioanyagok membrán affinitásának vizsgálata modellrendszereken	Kiss Éva			
Mechanikai változások szilárd elektródokon elektrokémiai folyamatok hatására	Láng Győző	hallgatók: kémia BSc		kv1n4fz5 Fizikai kémia labor, kv1n4fz6 Fizikai kémia 2. labor
Oxoanionok elektrokémiai redukciója				
Polielektrolit/tenzid elegyek fázistulajdonságainak szabályozása	Mészáros Róbert	Kémia BSc		
Mázás cserépedény hűtőhatásának kísérleti vizsgálata	Riedel Miklós	Tanár szakirány részére		
Átlagos nevezőjű perturbációs közelítések nanocsövek kölcsönhatásaira	Surján Péter			Kvantummechanika
Átmeneti intenzitások számítása korrelált hullámfüggvények esetében	Surján Péter			Kvantummechanika

Elágazásokat tartalmazó konjugált polimerek elektronszerkezete	Surján Péter				Kvantummechanika
Egzakt és közelítő megoldások a Hooke-atom példáján	Szabados Ágnes				Kémiai matematika és ezekből az egyik: emelt szintű Elméleti kémia, Kvantummechanika
Egyszerű Hartree-Fock program elkészítése	Szalay Péter				előfeltétel: emelt szintű elm. kém., fortran és/vagy C alapok
Az oxigén molekula gerjesztett állapotainak tanulmányozása kvantumkémiai módszerekkel	Szalay Péter				előfeltétel: emelt szintű elm. kém., fortran és/vagy C alapok

Amorf ötvözetbevonatok elektrokémiai előállítás	Sziráki Laura	Kémia BSc		fizikai kémia laborgyakorlat (kvIn4fz5)
Kristálynövekedés számítógépes modellezése	Tóth Gergely	Kémia BSc és vegyész M	számítógépes kutatás	
Kémia az erdőben	Tóth Gergely	Kémia BSc		
Kemometriai módszerek alkalmazása és fejlesztése	Tóth Gergely	Kémia BSc, vegyész MS	számítógépes kutatás	
Reakciómechanizmusok fejlesztése és vizsgálata	Turányi Tamás		Számítógépes kutatás	
Kvantumdinamikai szimulációk egyszerű modelleken	Túri László	Kémia BSc, tanár szak	Számítógépes kutatás	kötelező előfeltétel nincs, programozási alapismeretek előnyt jelentenek
Szabadenergia számítások molekuladinamikai szimulációk segítségével	Túri László		Számítógépes kutatás,	kötelező előfeltétel nincs, programozási alapismeretek előnyt jelentenek
Intelligens, lágy határretek előállítás és vizsgálata	Varga Imre	vegyész, tanár		
Nanokapszullák előállítás és hatóanyag- kibocsátásának vizsgálata	Varga Imre	vegyész, tanár		

Szerves Kémiai Tanszék

Az α -laktalbumin diszulfid hídjainak fotólízise; aromás aminosavak- és/vagy ezek környezetében lévő aminosavak hatásának tanulmányozása. Molekulamodellezés, ciklopeptid szintézis, spektroszkópiai vizsgálatok.	Deckerné Majer Zsuzsa			
---	------------------------------	--	--	--

β -hajtókanyar (β -hairpin) szerkezet: aszparagin- és glutaminsav a β -hajtókanyar szerkezetre gyakorolt hatásának spektroszkópiai jellemzése (cirkuláris dikroizmus, FTIR).	Deckerné Majer Zsuzsa			
Átmeneti fémionok és biomolekulák kölcsönhatásának spektroszkópiai vizsgálata (ródiom, ruténium).	Deckerné Majer Zsuzsa			
Arginin tartalmú diszulfidhidas peptidek szintézise és UV-fény érzékenységének vizsgálata	Deckerné Majer Zsuzsa			
Mikrohullámmal kiváltott szerves szintézisek	Dibó Gábor	Kémia BSc, Környezettan BSc		
Mikrohullámú szintézisek vizes és nem vizes közegben	Dibó Gábor	Kémia BSc, tanárszak		
Ionos folyadékok előállítása és szerves szintézisben való alkalmazásai	Dibó Gábor	Kémia BSc		
A gamma-valerolakton légkörkémiája	Dibó Gábor	Kémia BSc, Környezettan BSc, kémiai informatikus		
Levulinsav előállítása, átalakításai	Dibó Gábor	Kémia BSc, Környezettan BSc		
Bionassza átalakításai	Dibó Gábor	Kémia BSc, Környezettan BSc		
A kitin előfordulása és szerkezete	Dibó Gábor	Környezettan BSc		
A kitin katalitikus átalakítása	Dibó Gábor	Kémia BSc		
- A biofinomító lehetséges alapanyagai.	Mika László Tamás			
- Levulinsav szelektív hidrogénezése.	Mika László Tamás			
Bio-ionos folyadékok.	Mika László Tamás			
A kitin előfordulása és szerkezete	Mika László Tamás			
A kitin katalitikus átalakítása	Mika László Tamás			
Biodízel jellemzői és ipari előállítása.ü	Mika László Tamás			
Az utolsó 1% - az egyik legnehezebb zöld kémiai kihívás.	Mika László Tamás			
A szélenergia termelés alapjai és fenntarthatósága.	Mika László Tamás			
A bioetanol gyártás fenntarthatósága.	Mika László Tamás			

Bio-hidrogén előállítása	Mika László Tamás			
Hidrogén tárolás lehetőségei	Mika László Tamás			
Új ferrocéntartalmú szénhidrátszármazékok szintézise	Zsoldosné Mády Virág			
Új nitrogéntartalmú ferrocenil-heterociklusok szintézismódszerei	Zsoldosné Mády Virág			
Összefüggés szénhidrátok és mesterséges édesítőszer szerkezete és édesíz hatása között	Zsoldosné Mády Virág			
Új nitrogéntartalmú szénhidrát származékok szintézise	Zsoldosné Mády Virág			

Szervetlen Kémiai Tanszék

Ferrocéntartalmú királis foszfán ligandumok és alkalmazásuk.	Csámpai Antal	Kémia BSc, vegyész	Kísérlet	
Dikarboránok szintézise és alkalmazása	Csámpai Antal	Kémia BSc, vegyész	Irodalmazás	
Külső- és belsőszférás elektrontranszfer átmenetifém komplexek között.	Csámpai Antal	Kémia BSc, vegyész	Irodalmazás	
Hidrogénkötés mintázatok kristályokban	Harmat Veronika	Kémia BSc	irodalmazás	
Másodlagos szerkezeti elemek oligopeptidek kristályaiban	Harmat Veronika	Kémia BSc	irodalmazás	
Oxigén, kén és szelén tartalmú acetálok konformációinak elméleti vizsgálata	Magyarfalvi Gábor	Kémia BSc, vegyész	Számítógépes	
Kémiai tanulmányi versenyek feladatainak statisztikai alapú elemzése és értékelése	Magyarfalvi Gábor	Kémia BSc, tanári	Számítógépes	
Tanulmányi versenyfeladatok internetes adatbázisának felállítása távoktatási célokra	Magyarfalvi Gábor	Kémia BSc, tanári	Számítógépes	
Az aromaticitás jellemzése molekuláris mágneses sajátságok segítségével	Magyarfalvi Gábor	Kémia BSc, vegyész	Irodalmazás	
Aranyorganikus vegyületek	Pasinszki Tibor	Kémia BSc, vegyész	irodalmazás	
Platinaorganikus vegyületek és felhasználásuk	Pasinszki Tibor	Kémia BSc, vegyész	irodalmazás	
Higanyorganikus vegyületek és felhasználásuk	Pasinszki Tibor	Kémia BSc, vegyész	irodalmazás	
Katalitikus szililezési reakciók vizsgálata	Szalay Roland	Kémia BSc, vegyész	Kísérlet	
Nitrogéntartalmú heterociklusok előállítása szilil-karbamidátokból	Szalay Roland	Kémia BSc, vegyész	Kísérlet	
Szelektíven védett húgsav-származékok szintézise	Szalay Roland	Kémia BSc, vegyész	Kísérlet	
Naftálimido-ligandumot tartalmazó fémvegyületek szintézise	Szalay Roland	Kémia BSc, vegyész	Kísérlet	
Fémkomplexek előállítása szilán-eliminációs módszerrel	Szalay Roland	Kémia BSc, vegyész	Kísérlet	

A szilicszeszkvioxánok kémiája és felhasználása	Szalay Roland	Kémia BSc, vegyész	Irodalmazás	
Szilán-kapcsoló ágensek	Szalay Roland	Kémia BSc, vegyész	Irodalmazás	
Ónorgánikus vegyületek biológiai aktivitása	Szalay Roland	Kémia BSc, vegyész	Irodalmazás	
Átmeneti fémek molekula-komplexeinek szerkezete és alkalmazása	Szalay Roland	Kémia BSc, vegyész	Irodalmazás	
Szén-nanocsövek kémiai funkcionálizálása	Szalay Roland	Kémia BSc, vegyész	Irodalmazás	
Az ón szerepe a környezetterhelésben	Szalay Roland	Környezettan BSc	Irodalmazás	
Interaktív digitális tananyag készítése az általános kémia oktatásához	Szalay Roland	Kémia Bsc, tanári	Számítógépes	
Kémiai gőzfázisú rétegleválasztás	Szepes László	Kémia Bsc	Irodalmazás	
Rezgési spektrumok oldószerfüggésének vizsgálata	Tarczay György	Kémia BSc	kísérlet	
Kémia a hétköznapokban	Tarczay György	tanári	Kísérlet	
Átmenetifém-komplexek szintézise és fotoelektron spektroszkópiai vizsgálata	Vass Gábor	Kémia BSC	kísérlet + irodalmazás	

Elemi reakciók kísérleti nyomonkövetése esetén a kísérleti koncentráció-idő adatsorok a legtöbb esetben torzítottak, mivel a mérés során alkalmazott lézerpulzusok kiterjedése összemérhető a reakcióidővel. A torzítatlan jel teljesen általános (kinetikai modellt nem feltételező) helyreállítására készült egy genetikusan algoritmust alkalmazó program MatLab nyelven. A program grafikus képernyővel vezérelhető. Ennek továbbfejlesztése a feladat. Lehet programozni is, de nem szükséges. A program használhatóságának vizsgálata, az alkalmazás kiterjeszhetőségének bizonyítása elegendő lehet egy BSc szakdolgozathoz.

A szokásos perturbációs képletek fémes jellegű rendszerek esetében a kis energianevezők megjelenése miatt alkalmazhatatlanok.

Megvizsgálandó, hogy nem működnek-e jobban azok a módszerek, amelyek átlagos nevezőket alkalmaznak.

A feladat ilyen képletek levezetésének megértése.

A korrelált, sok determinánsból álló

hullámfüggvényekkel számított várható értékek és átmeneti intenzitások számítása nagy odafigyelést igénylő gondos munkát igényel. A feladat ilyen képletek levezetésének megértése, programozása, és alkalmazása nanoklaszterek esetében.

Benzolgyűrűkből kondenzált gyűrűk segítségével is képezhetünk oligomereket, vagy egyeszeres kötésekben keresztül. Az előbbire példa a poliacén, amelynek csak néhány monomert tartalmazó tagját tudták eddig előállítani, az utóbbira a poli-parafenilén. A poliacén, ha létezne, fémes jellegű lenne, míg a poli-parafenilén félvezető. Érdekes, új típusú molekulák állnak elő, ha ezt a két kapcsolódási sémát felváltva alkalmazzuk, pl. elágazásokat tartalmazó láncban egyik irányban kondenzált, a másik irányban C-C kötésekben keresztül történő kapcsolódást alkalmazzunk. A feladat ilyen molekulák tervezése, és elméleti számítások végzése a konjugált pi elektronrendszer szerkezetének feltérképezése céljából.

A Hooke-atom egy hélium-szerű atom, amelyben a mag-elektron Coulomb-kölcsönhatás helyett a két elektront rugó köti az origóhoz (azaz gömbszimmetrikus harmonikus potenciálban mozognak). A probléma érdekessége, hogy egzakt megoldásai Sommerfeld-féle polinom módszerrel megkaphatók. A Hooke-atom példáján ezért jól tanulmányozható a kvantumkémiaili módszerek teljesítőképessége. Vizsgálható például a Hartree-Fock eljárás és kidolgozható egy erre épülő perturbációs közelítés. A feladat magában foglalja az irodalomból ismert egzakt megoldás megértését, a közelítő módszerek levezetését a Hooke-atomra, az eljárások programozását és numerikus tesztelését.

