

**A 7. féléves kötelezően választható
laboratóriumi gyakorlatok listája vegyész és
informatikus vegyész hallgatóknak (régi
képzés)
2009/2010 1. félév**

Felveendő összes (heti) óraszám: 16

Minden, a korábbi tanszékek nevével fémjelzett téma heti 4 órás laborokat jelent, kivétel a Szerves Kémia, amely heti 8 óra. A 4 órás laborok egy negyedévre heti 8 órába összesűrítve zajlanak.

A laborok időpontja hétfő és szerda.

Fontos: Vegyék figyelembe a témáknál külön jelzett esetleges idő-, létszám- illetve tanulmányeredmény-korlátokat!

Jelentkezés Homonnay Zoltán laborkoordinátornál*

Jelentkezési határidő: május 30.

(143. szoba, homonnay@ludens.elte.hu)

*A 143. sz. szoba ajtaján kifüggesztett listára kell feliratkozni. Ez természetesen nem helyettesíti az etr-es jelentkezést, csak az ütközésmentes beosztást szolgálja.

Analitikai Kémia

kurzuskód: kvvn4801

A meghirdető neve: Orbán Miklós egyetemi tanár és Zihné Perényi Katalin adjunktus

A kötelezően választható labor címe: Műszeres analízis II.

Az előző évekhez hasonlóan, a laboratóriumot az **I. negyedévében** 7 héten át **hetenként hétfőn és szerdán 8-8 órában** bonyolítjuk, **maximálisan 24 fő** IV. éves vegyészhallgató számára. 6 héten át gyakorlatok zajlanak, a 7. héten ZH írásra kerül sor.

A labor felvételének **feltétele**, hogy a jelentkező hallgatóknak mind az **Analitikai kémia**, mind a **Műszeres analízis** tárgyakból **sikeres kollokviumuk** legyen, illetve ezen tárgyakból a **laboratóriumi gyakorlatot** is sikerrel elvégezzék.

A hat gyakorlat tematikája a következő:

Talajminták As/Se szennyezésének meghatározása hidridgenerálással kapcsolt induktív csatolású plazma atomemissziós spektrometria (ICP-AES) alkalmazásával.

Barlangi üledék szekvenciális kioldása és Cu/Pb-tartalmának meghatározása grafitkemencés atomabszorpciós spektrometriával (GF-AAS).

Duna-víz szerves nyomszennyezőinek meghatározása gázkromatográfiával, tömegspektrometriás detektálással (GC-MS).

Gyógyszer vizsgálata folyadékkromatográfiás-tömegspektrometriás módszerrel (HPLC-MS)

Molekuláris szenzorok vizsgálata fluoreszcenciával. Na⁺, K⁺ K_a meghatározása

Különböző nagyteljesítményű analitikai módszerek megismerése interaktív oktatóprogram (ACOL) segítségével. Mérések számítógépes vezérlése és off-line értékelése.

A többség bejegyzése esetén ellátogatunk Dunaújvárosba, a Qualitest Lab. laboratóriumába, ahol valós körülmények között ismerkedünk meg számos analitikai (rutin és kutató) módszerrel (XRF, TIC/TOC, S-, O-, N-, C-meghatározás, OES és az országban egyedülálló GD-OES felületanalízis)

Egy-egy gyakorlatot két-két hallgató végez, így összesen 24 fő vehető fel maximálisan a gyakorlatra.

Elméleti Kémia

Kurzuskód: kvvn4201

kötelezően választható gyakorlat

(vegyész IV. évfolyam, 1. félév – őszi);

hallgatói létszám: max. 12 fő/csoport, max. 2 csoport);

Egyik csoport a szemeszter első felében, másik a másodikban

Cím: Számítógépes szerkezetkutatás

Heti 4 óra, 8 órás tömörítésben

A gyakorlat alapszinten felöleli a modern számítógépes kémia módszereinek jelentős részét, melyek három fő irányba sorolhatók. Ennek megfelelően a feladatcsoportok és a felelős témavezetők:

I. *Molekulák elektronszerkezetének és szerkezeti tulajdonságainak kvantumkémiai számítása.*

Császár Attila egy. tanár – Fogarasi Géza egy. tanár – Szalay Péter egy. tanár

II. *Folyadékok szerkezetének modellezése és szimulálása statisztikus mechanikai módszerekkel.* Baranyai András egy. tanár – Tóth Gergely docens.

III. *Molekulamodellezés.* Náray-Szabó Gábor egy. tanár.

A gyakorlat áttekintő ismereteket kíván nyújtani, így értelemszerűen minden hallgató mindhárom feladatcsoportot elvégzi. A foglalkozások intenzív tutoriális formában folynak, a felkészüléshez tanári segítséget és angol nyelvű irodalmat adunk. Az értékelés (osztályzás) alapja az egyes területeken kijelölt számítási feladatok elvégzése, megfelelő jegyzőkönyv készítése és a kurzus végén egy, az elméleti háttér főbb vonásait visszakérdező zárthelyi dolgozat.

A rendelkezésre álló számítógépek: linux alapú PC-k a laborban, valamint egy Beowulf klaszter.

Jelen gyakorlat teljesítése kötelező azok számára, akik a 8. félévben fel akarják venni a fenti munkatársak vagy Surján Péter egy. tanár által meghirdetett valamelyik speciális laboratóriumi gyakorlatot.

A tématerületek rövid ismertetése:

I. Kvantumkémia - elméleti molekulaszervezet kutatás

A gyakorlat elsődleges célja a kvantumkémiai számítási módszerekkel való megismerkedés. Ezekhez kapcsolódóan molekulamechanikai módszerekkel is foglalkozunk. A kvantumkémiai számításokat *ab initio* Hartree–Fock, illetve elektronkorrelációs módszerekkel végezzük. A konkrét számítási feladat lehet egy molekula adott tulajdonságainak (molekulageometria, rezgési színek, potenciálfelület, elektrongerjesztési energia, NMR kémiai eltolódások, stb.) meghatározása. A számítások kész programrendszerekkel (PQS, Gaussian98, Turbomole, ACESII) végezhetők el.

II. Folyadékok szerkezetének elmélete

A gyakorlat során a hallgatók vázlatos képet kapnak azokról a statisztikus mechanikai módszerekről, amelyek a folyadékok egyensúlyi szerkezetének és termodinamikai tulajdonságainak leírásánál használatosak. Megismerkednek a számítógépes szimulációkkal és ezeknek a kísérleti módszerekkel (pl. neutron- és röntgendiffrakció) való kapcsolatával. A hallgatók kész (Monte Carlo és un. Reverse Monte Carlo) programokkal végezhetnek számításokat egyszerűbb rendszerekre.

III. Molekulamodellezés

A gyakorlat során a hallgatók megismerik a széles körben használt HYPERCHEM szoftvert, mely elsősorban kis szerves molekulák és fehérjék modellezésére alkalmas. Megtanulják, hogyan kell megszerkeszteni és megjeleníteni egy molekula modelljét, hogyan kell molekulamechanikai és szemiempirikus kvantumkémiai számításokat végezni a modell alapján, és hogyan lehet ábrázolni a számítások eredményeit. Lehetőség van molekuladinamikai számítások elvégzésére és az eredmények interpretálására is.

Fogarasi Géza
egyetemi tanár

Magkémia

kurzuskód: kvvn4601

(Felelős és további információk: Lévay Béla)

TEMATIKA ÉS SEGÉDLETEK

(1) Konverziós elektron Mössbauer-spektroszkópia (1x8 óra, KLENCSÁR ZOLTÁN)

Különleírás alapján.

Elvárt ismeretek: Mössbauer-spektroszkópia a magyar nyelvű leírás alapján; detektorok, diszkriminátorok működése.

(2) Izotóphígításos analízis (1x8 óra, HOMONNAY ZOLTÁN)

A mérés leírása (IV.8) számon megtalálható a Fodorné Csányi Piroska - Vértes Attila féle Magkémiai gyakorlatok c. jegyzetben.

Elvárt ismeretek: a IV/8. mérésleírásban foglaltak, az izotóphígításos analízis elve, a

béta-sugárzás és az anyag kölcsönhatásának alapjai, a béta-sugárzás detektálása, sugárvédelem nyílt izotópos munka esetén.

Különleírásos olvasmány a RIA-módszerről.

(3) Pozitronannihilációs élettartam-spektroszkópia (a), (b) (2x4 óra, LÉVAY BÉLA)

a) Az o-Ps és nitro-benzol közötti kémiai reakció sebességi állandójának mérése metanolban.

b) A pozitroniumképződés inhibíciójának vizsgálata NO₃-ion hatására vizes oldatokban.

Mindkét esetben pozitronélettartam-spektrumok felvétele a reaktáns koncentrációjának a függvényében.

Magyar nyelvű cikk és rövid elméleti összefoglaló alapján.

Elvárt ismeretek: az elméleti összefoglaló anyaga, a koincidenciamérések elve, béta-bomlások, gamma-anyag kölcsönhatás, gamma-fotonok detektálása.

(4) Folyadékszcintilláció (a), Cserenkov-fotometria (b) (1x8 óra, ATOMFIZIKA TSZ.:

HORVÁTH ÁKOS ÉS ANALITIKAI KÉMIAI TSZ.: LÉVAY BÉLA)

Angol nyelvű cikk és magyar nyelvű különleírás alapján.

a) Víz radontartalmának mérése folyadékszcintillációval.

b) Nátrium-dikromát koncentrációjának meghatározása vizes oldatban természetes ⁴⁰K-izotóp sugárforrást alkalmazó Cserenkov-fotometria segítségével.

Elvárt ismeretek: a szcintillációs detektorok működési elve, a koincidenciakapcsolás elve, a Cserenkov-sugárzás elmélete, Lambert–Beer-törvény.

(5) Prompt-gamma aktivációs analitika (1x8 óra, SZENTMIKLÓSI LÁSZLÓ, MTA IKI)

Magyar nyelvű különleírás alapján.

Elvárt ismeretek: a különleírás anyaga és az általánosan elvárt magkémiai alapok.

(6) Kísérletek gamma-fotonokkal (2x4 óra, SÜVEGH KÁROLY)

(a) Fénysebesség mérése pozitronannihilációval

A fénysebességet korrelált fotonok útkülönbségének és a detektálásuk közt eltelt idő mérésével határozzuk meg.

Segédanyag: rövid angol nyelvű cikk, vázlatszerű magyar nyelvű összefoglaló.

Elvárt ismeretek: a koincidenciamérés elve, emlékek a szögkorrelációs mérésekről.

(b) Compton-visszaszórás mérése

Egy és két-detektoros rendszerben mérjük a visszaszórt fotonok energiaeloszlását.

Segédanyag: rövid angol nyelvű cikk, vázlatszerű magyar nyelvű összefoglaló.

Elvárt ismeretek: a Compton-szórás (nagy vonalakban), gamma spektroszkópia.

(c) Doppler-kiszélesedés mérése

Annihilációs gamma-fotonok energiaeloszlását mérjük különböző anyagokban.

Segédanyag: vázlatszerű magyar nyelvű összefoglaló.

Elvárt ismeretek: gamma-spektroszkópia.

Szerves Kémia
kurzuskód: kvvn4701

Szerves Kémiai Laboratóriumi gyakorlat II.

Bodor Andrea

- (1) Cargo-fehérjék NMR-spektroszkópiája.

Bősze Szilvia

- (1) M. tuberculosis T-sejt építő peptidek és származékaik szintézise.
- (2) M. tuberculosis T-sejt építő peptidek és származékaik hatása humán sejtekre.
- (3) Új antituberkulotikumok in vitro hatásának vizsgálata HRV 37 törzsön és humán sejteken.

Dibó Gábor

- (1) Mikrohullámmal kiváltott szerves szintézisek.
- (2) Nanocsövek kémiai módosítása.

Farkas Ödön

- (1) A molekula modellezés korszerű módszerei.
- (2) Molekula dinamika szimulációk a peptidek szerkezetvizsgálatában.
- (3) QSAR eljárások alkalmazása és fejlesztése.
- (4) Szerves kémiai reakciók vizsgálata elméleti módszerekkel.

Gáspári Zoltán

- (1) Kémiai és bioinformatikai módszerek a fehérje kutatásban.
- (2) Bioaktív fehérjék NMR-spektroszkópiája.

Hudecz Ferenc

- (1) Szubsztituált fluoreszcens naftil-oxazolok szintézise.
- (2) Tumorelles szer-peptid konjugátumok hatásmechanizmusának vizsgálata.
- (3) Tumorelles szer-peptid konjugátumok lebomlása lizoszómában.

Jalovszky István

- (1) Többlépéses szerves szintézisek

Magyar Anna

- (1) Ópioid peptid származékok szintézise
- (2) Fillagrin szerepe a rheumatoid arthritisben.

Majer Zsuzsa

- (1) Átmeneti fémek komplexképződési vizsgálata aminosavszármazékokkal.

Majer Zsuzsa-Illés Eszter

- (1) Modellvegyületek: a) cisz-transz peptidkötés tanulmányozására
b) triptofán szerepének tanulmányozására fotolízisben.

Mező Gábor

- (1) Oligotuftsín alapú hordozó molekulák szintézise hatóanyagok célbajuttatására.
- (2) Multifunkciós tumorelles hatóanyagok szintézise.

Perczel András

- (1) Racionális gyógyszertervezés: proteáz-inhibitorok szerkezetvizsgálata.
- (2) Peptidek és fehérjék szerkezetvizsgálata többdimenziós NMR-módszerekkel.
- (3) Molekula modellezés ab initio módszerekkel szuper-számítógépen.
- (4) Nem-természetes aminosavból felépülő peptidek vizsgálata.
- (5) Rendezetlen fehérjék NMR-spektroszkópiája.
- (6) Minifehérjék teljeskörű szerkezetvizsgálata.

Rábai József

- (1) Perfluoralkán oldhatóságot fokozó reagensek tervezése és szintézise; a fluorofilias kísérleti meghatározása gázkromatográfiás módszerrel.

- (2) Fluoros ionos-folyadékok szintézise.
- (3) Heterogenizált (azaz hordozós) fluoros fázisok és reagensek tervezése és szintézise.

Szabó Dénes

- (1) Optikailag aktív fluoroorganikus vegyületek szintézise.

Uray Katalin

- (1) Autoimmun fehérjék epitóp térképezése.

Vass Elemér

- (1) Királis szerves molekulák és molekulakomplexek térszerkezet-vizsgálata FTIR és VCD spektroszkópiával.

Zsoldosné Mády Virág

- (1) Cukorszármazékok szintézise és szerkezetvizsgálata

Szervetlen Kémia
kurzuskód: kvvn4101

Szerkezeti kémia (vegyész hallgatók számára)

Az elérendő cél

A szerkezeti szervetlen kémia témaköréhez kapcsolódó preparatív, elválasztás-technikai és szerkezetvizsgálati módszerek gyakorlati elsajátítása, a mérési eredmények interpretálása.

Részletes program

Preparatív és gázkromatográfiás laboratóriumi gyakorlatok:

Inert atmoszférás szintézistechnikák megismerése: berendezés építése, szintézisek kivitelezése, termékek tisztítása, mintaelőkészítés szerkezetvizsgálatra. Reakciókövetés és termékek tisztaságvizsgálata gázkromatográffal.

IR, NMR, GC-MS, UPS és XRD szerkezetvizsgálati módszerek:

Mérési módszerek, mérőberendezések részegységeinek és az egyszerűbb mérések metodikájának megismerése. Mérések elvégzése, mérési eredmények értelmezése.

Gyakorlatvezető

Rohonczy János egyetemi docens és társ-gyakorlatvezetők

Irodalom (ajánlott)

Bochmann M.: Organometallics 1-2, Oxford Sci. Publ., 1994

Sohár P.: Mágneses magrezonancia-spektroszkópia, Akadémiai Kiadó, 1976

Böcskei Zs.: Fehérjemolekulák atomi szerkezetének vizsgálata röntgendiffrakcióval, Kémiai Közlemények, 73 (1991) 191-223

Holly S., Sohár P.: Infravörös spektroszkópia, Műszaki Könyvkiadó, 1968

Briggs D.: Handbook of x-ray and ultraviolet photoelectron spectroscopy, Heyden & Son Ltd.

Számonkérés

mérési feladatok jegyzőkönyvezése minden gyakorlaton.

írásbeli számonkérés a félév végén a gyakorlat és a kapcsolódó elmélet anyagából.
gyakorlati jegy a félév végén.

A Tanszék a félév során összesen 4 db. hatos csoportot fogad, tehát negyedévenként $2 \times 6 = 12$ hallgatót.

Feltétel: legalább 3-as osztályzat a harmadéves Szervetlen és fémorganikus laborgyakorlaton, a Szerkezeti kémia és a Fémorganikus kémia előadáson.

Kolloidkémia és Kolloidtechnológia
kurzuskód : kvvn4501

felelős vezető: Gilányi Tibor egy. tanár

1. Elektrokinetikai potenciál meghatározása mikroelektroforézissel. (Csemesz Ferenc)
2. Dinamikus nedvesedés vizsgálata tenziometrikus módszerrel. (Kiss Éva)
3. Langmuir filmek vizsgálata víz-levegő határfelületen. (Kiss Éva)
4. Polelektrolit/tenzid complex töltésének vizsgálata elektroforetikus módszerrel. (Mészáros Róbert, Mezei Amália)
5. Polelektrolit/tenzid oldatok dinamikus felületi feszütségének vizsgálata. (Mészáros Róbert, Mezei Amália)
6. Dinamikus fényszóródás-mérések. (Gilányi Tibor)
7. Határfelületek Monte Carlo szimulációja (Jedlovsky Pál, Pártay Lívia)
8. Kationos-anionos kettős tenzidek adszorpciója (felületi feszültség mérések számítógépes csepp-profil analízissel) (Mészáros Róbert)
9. Határfelületek vizsgálata nemlineáris optikai módszerrel. (Mészáros Róbert, Keszthelyi Tamás, KKKI)

A gyakorlatok a 2. negyedévben zajlanak.

Fizikai kémia

Kurzuskód: kvvn4301

Tanulmányi követelmények a „fizikai-kémia II.” laboratóriumi gyakorlaton

A gyakorlatok ideje: a félév II. fele (2009. november –2009. december)

I. Választható mérések (2009. április):

- 1.[#] Poláris molekula dipólusmomentumának meghatározása.
{ P. 6.1., Mika József, Sas Norbert, Láng Győző }
- 2.[#] Törésmutató, diszperzió, moláris refrakció meghatározása refraktométerrel.
{ P. 6.6., Mika József, Sas Norbert, , Láng Győző }
3. Mágneses szuszceptibilitás mérése Quincke-módszerrel.
{ P. 6.4., Mika József }
4. Fajlagos forgatóképesség és koncentráció meghatározása polariméterrel.
{ P. 6.8., Mika József }
5. Két folyadék törésmutató-különbségének meghatározása Zeiss-interferométerrel.
{ P. 6.7., Mika József }
6. Benzilalkohol asszociációs számának és önasszociációállandójának meghatározása FT-IR spektrofotométerrel.
{ Takács Mihály }
- 7.[#] Indikátorok abszorpciós spektrumának tanulmányozása a látható színek tartományban.
{ P. 6.9., Láng Győző }
- 8.[#] Spektrofotometriás mérések az UV tartományban, moláris tömeg spektrofotometriás meghatározása.
{ P. 6.10., Láng Győző }
9. Fémek anódos passziválásának vizsgálata ciklikus voltammetriával.
{ Sziráki Laura }
10. Elektrodreakció vizsgálata impedanciaspektroszkópiával
{ Sziráki Laura }
11. Számítógépes mérés technika
{ Szalma József }
12. Vizsgálatok pásztázó alagútmikroszkóppal.
{ Kerner Zsolt }

13. Hidrogén elnyelődésének és diffúziójának vizsgálata fémekben. { Péter László }
14. Fotokémia { Demeter Attila }

Csak együtt választhatóak

II. A gyakorlat rendje:

A felsorolt mérésekből 5 mérés választható. Bizonyos méréseknél a jelentkezési létszám maximált. A jelentkezéseket érkezési sorrendben fogadjuk el.

A gyakorlatok elvégzéséhez szükséges időt, a mérések elkezdésének időpontját, a résztvevők számát, a felkészülés módját, illetve a jegyzőkönyvek beadási határidejét a gyakorlatot vezető oktatókkal kell előzetesen egyeztetni. (A mérések elvégzéséhez általában 8 óra szükséges.)

Csak azok a hallgatók vehetnek részt a gyakorlaton, akiknek a gyakorlat elején írt „beugró” dolgozata sikeres. Sikertelen dolgozat esetén elégtelen (1) elméleti jegyet is adunk. A sikertelen beugró dolgozatok miatt elmaradt mérések közül legfeljebb 1 pótolható.

A gyakorlat teljesítésének feltételei: a) a választott mérések legalább 80%-ának sikeres végrehajtása (4 elfogadott jegyzőkönyv); b) Részvétel az előkészítő előadásokon. c) Az elméleti jegyek átlaga legalább elégséges (2).

A jegyzőkönyvek minősítése: „jó” (4-5), „megfelelő” (2-3), „számolás”, illetve „nem megfelelő” (1).

Az egyes gyakorlatokon végzett munkát és az elméleti felkészültséget a gyakorlatvezető a gyakorlat végén a jegyzőkönyvben 1 vagy 2 jeggyel értékeli (“elméleti” jegyek: 0-5). A jegyzőkönyvek beadásának határideje: a gyakorlat elvégzésétől számított 1 hét.

A gyakorlati jegyet a jegyzőkönyvek minősítése és az elméleti jegyek alapján állapítjuk meg. A késve beadott, vagy hiányzó jegyzőkönyveket az átlag számításánál “0” érdemjeggyel vesszük figyelembe. A gyakorlatok elvégzéséhez szükséges tudnivalók részben a <http://foundation01.chem.elte.hu> honlapon, részben a "Bevezetés a fizikai kémiai mérésekbe" c. jegyzetben (szerk. Kaposi Olivér, Tankönyvkiadó, Budapest) találhatóak meg, illetve azokat az előkészítő előadásokon vagy az 1. gyakorlaton ismertetjük. A mérésekhez esetenként kiegészítő anyagokat adunk ki. A mérésekhez kapcsolódó elméleti anyag magában foglalja a fizikai kémia előadások keretében elhangzottakat is. A gyakorlathoz igény esetén speciális kollégium kapcsolódik, amelyre a félév elején az ETR-ben lehet jelentkezni.

Az esetleges töréskárt a szorgalmi időszak végéig rendezni kell, ez egyébként feltétele a leckekönyv aláírásának is.

A laborrenddel kapcsolatos további részleteket az előkészítő foglalkozásokon beszéljük meg.

A gyakorlatokon csak olyan hallgató kezdheti meg a munkát, aki a tűz- és munkavédelmi oktatáson részt vett, a laborrendet elfogadta, és mindezt aláírásával is igazolta! Ennek ellenőrzése a mindenkorai gyakorlatvezető feladata és felelőssége.

A gyakorlatokra mobiltelefont hozni tilos!

Budapest, 2009. április

Láng Győző
egyetemi tanár