

**Diplomamunka/szakdolgozati és projektmunka témakörök a 2014/2015.
tanév I. félévére**

Fizikai Kémiai Tanszék

Dr. Bényei Attila

Átmenetifém komplexek szerkezetének vizsgálata egykristály röntgendiffrakcióval (Vegyész MSc)

A feladat az egykristály röntgen diffrakciós szerkezet meghatározáshoz használt alapvető programok megismerése, néhány szerkezet megoldása és finomítása. - **a témára jelentkezőt várunk**

Folytonos szimmetria mérték hidrogén hidas szerkezetek összehasonlításában (vegyész MSc, vegyészmérnök BSc, kémia BSc)

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

Szerkezet meghatározása pordiffrakciós adatokból (vegyész MSc, vegyészmérnök BSc, kémia BSc)

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. - **a témára jelentkezőt várunk**

Krisztallográfiai adatbázisok használata, molekulacsaládok összehasonlítása (kémia BSc, Vegyész MSc)

Egy megadott molekulacsalád krisztallográfiai adatbázisban való keresése és a szerkezetek összehasonlítása. - **a témára jelentkezőt várunk**

Dr. Gáspár Vilmos és Dr. Ösz Katalin:

Klór-fenolok redukív dehalogénezése 10-metilakridin-származékok által kiváltott fotokatalízissel

Klór-fenolok redukív dehalogénezése nátrium-formiáttal

Győrváriné Dr. Horváth Henrietta

Ru-komplexek előállítása és alkalmazása környezeti szennyezők felszámolására

Dr. Kathó Ágnes és Gombos Réka

A Rh-indigókármin komplex katalitikus tulajdonságainak vizsgálata hidrogénezési reakciókban

Dr. Kathó Ágnes és Dr. Udvardy Antal

Pt-fémet tartamazó, vízdoldható komplexek katalitikus tulajdonságainak vizsgálata kétfázisú rendszerekben

Dr. Ósz Katalin:

Klórfenolok redukív fotokémiai klórmentesítésének kinetikai vizsgálata

Halogénezett 1,4-benzokinonoknak és származékaiknak a fotokémiai klórmentesítése

Dr. Ósz Katalin és Józsa Éva:

Fényérzékeny 1,4-benzokinonok redukív halogénmentesítése

1,4-Benzokinonok fotoreakciójának vizsgálata száloptikás fotoreaktorban

Dr. Póta György:

Reakciókinetikai problémák elméleti vizsgálata (vegyész MSc, vegyészmérnök BSc, kémia BSc)

A kémiai reakciók időbeli lefolyását közönséges differenciálegyenletekből álló rendszerek írják le. E rendszerek megoldásával, egyszerűsítésével, a megoldások jellegének felkutatásával egyrészt segítjük a kísérletekben észlelt viselkedésmód értelmezését, másrészt igyekszünk megjósolni új kinetikai viselkedésformákat, amelyek még nem köthetők konkrét kísérleti rendszerekhez. A vizsgálatok elsősorban a multistabilitás, oszcilláció, kémiai erősítés területét célozzák meg. A témához elméleti-matematikai hajlam, informatikai érdeklődés, továbbá a differenciálegyenletek témakörében előírt ismeretek elsajátítása szükséges. - **a témára jelentkezőt várunk**

Dr. Purgel Mihály:

Ruténium(II)-komplexek izomériájának vizsgálata kvantumkémiai számításokkal (kémia BSc)

Vízoldható ruténium(II)-komplexek izomereinek tanulmányozása különböző kvantumkémiai módszerekkel. A hidrogénnyomás, illetve a közeg kémhatása jelentős mértékben befolyásolja a cisz-transz izomériát. Ezen izomerek relatív energiáinak összevetése, valamint azok kialakulásának tanulmányozása a cél. - **a témára jelentkezőt várunk**

Fém-komplexek intramolekuláris átrendeződésének kvantumkémiai vizsgálata

Ruténium(II)-komplexek katalitikus aktivitásának vizsgálata kvantumkémiai számításokkal (vegyész MSc)

Különböző szubsztrátumok hidrogénezési és hidrodehalogénezési folyamatainak vizsgálata kvantumkémiai módszerekkel. A cél a kísérleti úton meg nem határozható intermedierek és átmeneti állapotok azonosítása, a mechanizmus felderítése. - **a témára jelentkezőt várunk**

Kvantumkémiai számítások a Pd(QS)₂ aktív formájának kialakulására és szerepére katalitikus folyamatokban