

Tartalomjegyzék

Előszó	2
Specializációválasztás a Vegyész mesterszakon	6
A Vegyész mesterképzési szak (MSc) tantervének szerkezete (1. táblázat)	8
A Vegyész mesterszak tantervi hálói	9
I. Nappali tagozat	9
2. Táblázat: Természettudományos alapismeretek (BSc + MSc összesen 31 kredit):	9
3. Táblázat: Szakmai törzsanyag (kötelező 48 kredit):	9
4. Táblázat: Szabadon választható szakmai tárgyak (max. 30 kredit)	10
5. táblázat: Az analitikus vegyész specializáció kötelező és választható tárgyai (30 kredit)	11
7. táblázat: A radiokémikus specializáció kötelező és választható tárgyai (30 kredit)	13
II. Levelező tagozat	14
A tanterv összeállításánál alkalmazott alapelvek:	14
8. táblázat: A levelező vegyész MSc képzés tantervi hálója féléves bontásban	15
1. Természettudományos alapismeretek	17
2. Szakmai törzsanyag	20
3. Szabadon választható szakmai tárgyak	30
4. Analitikus vegyész specializáció	47
5. Szintetikus vegyész specializáció	56
6. Radiokémikus vegyész specializáció	65
Vegyész MSc diplomamunka	75
1. A diplomamunka lehetséges témaköre és tantervi elhelyezése:	75
2. A jelentkezés és felvétel szabályai:	75
Az idegen nyelvi követelmények teljesítésének feltételei	75
Testnevelési követelmények	75
Záróvizsga	76
Az oklevél minősítése	77

Előszó

Tisztelt Hallgatók!

Az egységes európai felsőoktatási rendszer kialakítását célzó – közismert nevén bolognai – folyamat megvalósításaképpen 2006. szeptemberétől a magyar felsőoktatásban is általánosan bevezetésre került a lineáris képzési rendszer: alap-(vagy BSc-) képzés 6-8 félév; mester-(vagy MSc-) képzés 4 félév; doktori (vagy PhD) képzés 6 félév.

Ennek a nagyarányú átalakulásnak a keretében a Debreceni Egyetem Természettudományi és Technológiai Karán 2009. nyarán fejezték be először tanulmányaikat az alapképzési szakok hallgatói. Ezzel párhuzamosan szeptemberben indultak el a mesterképzési vagy MSc kurzusok. Ez a kiadvány a vegyész mesterszaknak az összegyűlt tapasztalatok alapján 2014. tavaszán javított, módosított tantervét és tantárgyi programjait tartalmazza.

A mesterképzési szakokon tanulmányaikat elkezdő hallgatók számára már jól ismertek az egyetemi képzés sajátosságai, beleértve ebbe az oktatási rendszer szabadságából adódó előnyöket és hátrányokat is. Ennek ellenére fontosnak tartjuk és kérjük, hogy tanulmányaik megkezdése előtt szánjanak időt a tanterv (és a tanulmányokra vonatkozó egyetemi szabályzatok) részletes megismerésére, ugyanis csak így tudnak felelősen élni az egyetemi oktatás adta lehetőségekkel. E tájékozódásban természetesen a Kar és a Kémiai Intézet oktatói és munkatársai igyekeznek messzemenő segítséget biztosítani.

A vegyész mesterképzést azzal a céllal terveztük meg, hogy az minél szélesebb körű ismeretekkel ruházza fel a végzetteket. Ez teheti lehetővé, hogy a végzett vegyészek a gyakorlati élet legkülönbözőbb területein megállhassák helyüket az iparban, különös tekintettel a vegyiparban, valamint a különböző minőségellenőrzési, minőségbiztosítási és kutató-fejlesztő laboratóriumokban is. Nem titkolt célja a mesterképzésnek az sem, hogy a legkiválóbbakat felkészítse a doktori (PhD) tanulmányokra, aminek legfontosabb elemét a kutatómunka szépségeivel és természetesen nehézségeivel való megismerkedés jelenti. Korábbi tanulmányaik tapasztalataiból már jól tudják, hogy a tudást nem adják ingyen, azért keményen és kitartóan meg kell dolgozni. Ebben a munkában a kémikus és más szakmabeli oktatók, illetve egyéb dolgozók a partnereik, együttműködésükre mindig számíthatnak. Bízunk benne, hogy ennek az együttes munkának a gyümölcse egy keresett, jó elhelyezkedési lehetőségeket biztosító diploma, vagy a doktori képzésbe való továbblépés lesz. Az oklevél európai elfogadását, és ezáltal nemcsak a hazai, hanem az európai elhelyezkedés és továbbtanulás lehetőségét is nagyban elősegíti a a Kémia Intézet által elnyert **Chemistry EuroMaster** minősítés.

A vegyész mesterszak tantervét a tapasztalatok és visszajelzések alapján ezután is folyamatosan igyekszünk majd korrigálni, finomítani és természetesen fejleszteni ezt a dokumentumot. Ehhez várjuk hallgatóink kérdéseit, megjegyzéseit és javaslatait is. Felsőfokú tanulmányaikhoz sok sikert kívánunk!

Debrecen, 2016. április

Dr. Várnagy Katalin s. k.
egyetemi docens
a DE TTK Kémiai Intézete
oktatási felelőse

Dr. Fábián István s.k.
egyetemi tanár
szakfelelős

- 1. A mesterszak megnevezése:** vegyész (Chemistry)
- 2. Képzési terület:** természettudomány
- 3. A mesterképzési szakon szerezhető végzettségi szint és a szakképzettség oklevélben szereplő megjelölése:**

- végzettségi szint: mesterfokozat
(magister, master; rövidítve: MSc)
- a szakképzettség angol nyelvű megjelölése: szakképzettség: okleveles vegyész
Chemist (MSc)
- választható specializációk: analitikai kémia,
szintetikus kémia
radiokémia
(Analytical Chemistry,
Synthetic Chemistry
Radiochemistry)

Szakfelelős: Dr. Fábián István, egyetemi tanár

4. Az oklevélben megjeleníthető specializációk:

analitikus vegyész

szakfelelőse: Dr. Gáspár Attila egyetemi docens

szintetikus vegyész

szakfelelőse: Dr. Kurtán Tibor, egyetemi tanár

radiokémikus vegyész

szakfelelőse: Dr. Nagy Noémi, egyetemi tanár

5. A képzési idő félévekben: 4 félév

6. Az alapfokozat megszerzéséhez összegyűjtendő kreditpontok száma: 120

- 6.1. Az alapozó ismeretekhez rendelhető kreditek száma: 10-18 kredit;
- 6.2. A szakmai törzsanyaghoz rendelhető kreditek száma: 35-45 kredit;
- 6.3. A differenciált szakmai anyaghoz rendelhető kreditek száma: legalább 30 kredit;
- 6.4. A szabadon választható tantárgyakhoz rendelhető kreditek minimális értéke: 6 kredit;
- 6.5. A diplomamunkához rendelt kreditérték: 30 kredit;
- 6.6. A gyakorlati ismeretek aránya: az intézményi tanterv szerint legalább 40 %.

7. A vegyész mesterszak képzési célja, az elsajátítandó szakmai kompetenciák:

A képzés célja a szakterület, a gazdaság és a munkaerőpiac igényeinek megfelelően olyan vegyészek képzése, akik szakterületükön magas szintű elméleti és gyakorlati kémiai ismeretekkel, a rokon szakterületeken (pl. matematika, fizika, informatika, szakmai idegen nyelv) megfelelő szintű alaptudással rendelkeznek; alkalmasak – elsősorban a kutatás és a műszaki fejlesztés területén – a választott tudományterületükön kezelhető feladatok és problémák önálló tanulmányozására és megoldására, valamint anyagok előállítására és kémiai átalakítására, azok minőségi és mennyiségi vizsgálatára, szerkezetük meghatározására; önálló és irányító munkakörökben láthatnak el például a vegyipari termelésben és más gazdasági ágazatokban, igazgatási területeken, a környezetgazdálkodásban és környezetvédelemben, minőségbiztosítási és minőségellenőrzési területeken.

a) A mesterképzési szakon végzettek ismerik:

- a szakmához kötött legfontosabb elméleti és gyakorlati ismereteket és laboratóriumi szintű alkalmazásukat;

- a kémiai ismeretek rendszerezett megértéséhez és elsajátításához szükséges módszereket;
- a vegyész munkahelyeken szükséges vezetői ismereteket;
- alkalmazói szinten a számítógépes kommunikáció és elemzés módszereit;
- a környezetvédelem, a minőségügy, a fogyasztóvédelem, a termékfelelősség, a munkahelyi egészség és biztonság, a műszaki és gazdasági jogi szabályozás alapvető ismereteit, illetve szabályait;
- a kutatáshoz vagy tudományos munkához szükséges problémamegoldó technikák alkalmazását.

b) A mesterképzési szakon végzettek alkalmasak:

- a törvényszerűségek, összefüggések megértésére, a megszerzett tudás alkalmazására és gyakorlati hasznosítására;
- a tudományágban megszerzett információk, felmerülő új problémák, új jelenségek feldolgozására;
- szakmai bírálat vagy vélemény megfogalmazására, döntéshozásra;
- feladatok önálló megtervezésére és végrehajtására;
- önművelésre, önfejlesztésre;
- a műszaki – gazdasági - humán erőforrások kezelésének komplex szemléletére,
- kémiai technológiai rendszerek biztonságos, környezettudatos működtetésére, fejlesztésére, szakterülettel kapcsolatos szolgáltatások, kereskedelmi feladatok ellátására, ezek kidolgozására,
- laboratóriumi, félüzemi és kísérleti üzemi kémiai feladatok elvégzésére, új kísérleti metodikák elsajátítására és fejlesztésére, különösen a választott specializációnak megfelelő területen;
- önálló feladatok ellátására a kémiai technológiai rendszerek fejlesztésében, új eljárások, termékek kifejlesztésében;
- tudományos kutatómunkára;
- legalább egy idegen nyelven szakmai dokumentáció, szakirodalom megértésére, kommunikációra; továbbá
- az analitikus vegyész specializáción szerzett ismeretek birtokában a korszerű analitikai, spektroszkópiai és tömegspektrometriai módszerek alkalmazására, a radioanalitika, élelmiszeranalitika, a kemometria alkotó felhasználására, a minőségbiztosítás, a gazdaság és a környezetvédelem legkülönbözőbb területein;
- a szintetikus kémiai vegyész specializáción szerzett ismeretek birtokában adott szerves vegyipari vagy gyógyszeripari munkahelyen a hatékony, innovatív munkához szükséges speciális ismeretek rövid idő alatt történő megszerzésére és felhasználására.
- a radiokémikus vegyész specializáción szerzett ismeretek birtokában a radioaktív izotópokkal való munkára, azok hatékony alkalmazására a nukleáris medicinában, atomenergetikában, környezetvédelemben, és a fenti alkalmazások fejlesztésére, új technológiák megtervezésére és kifejlesztésére

8. A mesterfokozat és a szakképzettség szempontjából meghatározó ismeretkörök:

8.1. Az alapképzésben megszerzett ismereteket tovább bővítő, mesterfokozathoz szükséges alapozó ismeretkörök (10-18 kredit):

természettudományos alapismeretek: matematika, fizika, biológia földtudomány, informatikai kémia;

8.2. A szakmai törzsanyag kötelező ismeretkörei: (35-45 kredit)

Szervetlen kémia: Koordinációs kémia. Szervetlen és komplex vegyületek előállítása és jellemzése, vizsgálatuk módszerei. Biológiai és gyakorlati szempontból jelentős ligandumok. Komplex vegyületek szerepe biológiai folyamatokban, gyógyászati,

környezetvédelmi, analitikai, stb. jelentőségük. Elemorganikus vegyületek jellemzése, gyakorlati vonatkozásokkal.

Szerves kémia: Retroszintézis, szintonok, szintézistervezés. Modern szerves kémiai szintézismódszerek, fémorganikus vegyületek alkalmazása szerves szintézisekben. Védőcsoportok és alkalmazásaik. Természetes forrásból származó és felszintetikus és szintetikus biológiailag aktív molekulák jellemzése és szintéziseik. Szerves kémiai reakciók mechanizmusának értelmezése, határmolekulapályák elmélete és alkalmazása, sztereoelektronikus hatások. Néhány alapvető nem-ionos mechanizmus. Bioreguláció. Komplex szerves kémiai feladat megoldása modern szerves kémiai szintézismódszerek alkalmazásával, kromatográfiás elválasztás, tisztaságellenőrzés, szerkezetazonosítás.

Fizikai kémia: Anyagszerkezet és elméleti kémia, fenomenologikus és statisztikus termodinamika, reakciókinetika, elektrokémia, kolloidkémia, kolloidtechnológia, környezeti kolloidkémia, radiokémia és izotóptechnika tárgykörökből a BSc ismeretekre építő, mélyebb elméleti összefüggéseket megismerése. Haladó fizikai kémiai gyakorlat, számítógépes kémia.

Analitikai kémia: Analitikai vizsgálatok tervezése, analitikai stratégiák természetes, ipari és környezeti minták minőségi, mennyiségi és speciációs analitikai vizsgálatához. Az analitikai módszerek teljesítőképességének összehasonlítása. Új analitikai módszerek érvényesítése (validálása). Mintavételi, mintaelőkészítési eljárások műszeres analízisekhez. Kalibrálás, standardizálás. Műszeres technikák, elválasztási módszerek elvének és gyakorlatának mélyebb elsajátítása. Kombinált analitikai eljárások speciációs analitikai célokra. On-line és folyamatos analitikai módszerek. Az elemzési adatok értékelési módszerei.

Műszaki kémia: Válogatott fejezetek a kémiai technológiából. A vegyészmérnöki tudomány alapjai.

8.3. A szakmai törzsanyag kötelezően választható ismeretkörei:

differentiált szakmai ismeretek: legalább 30 kredit

a) specializáció választása nélkül: A b) pontban felsorolt specializációk ismeretköreiből egyenként legalább 4 kredit értékű ismeret teljesítése.

b) specializáció választása esetén:

- Analitikus vegyész specializáció: A legelterjedtebb analitikai kémiai módszerek elméleti alapjai; a mérőműszerek felépítése, működési elve, alkalmazásai; a validálás és minőségbiztosítás szabályai; a mérések kiértékelésének módszerei; az analitikai kémia jelentősége a környezetvédelemben, a gyógyszer- és az élelmiszeriparban; az analitikai kémiai eredmények felhasználása, az eredmények alkalmazása a gazdasági és a non-profit szférában.

- Szintetikus kémiai vegyész specializáció: Korszerű szintetikus kémiai ismeretek (elméleti alapok és gyakorlati megvalósítási lehetőségeik), nagy hatékonyságú szintézistechnikák és technológiák. Előállítás és gyártás során alkalmazandó speciális eljárások. Biológiailag aktív molekulák hatásának biológiai alapjai, a tervezésüknél alkalmazott módszerek. A kutatás-fejlesztés és gyártás során jelentkező elválasztási, szerkezetazonosítási és szerkezetfelderítési tevékenység alaptechnikái.

- Radiokémikus vegyész specializáció: Radioaktív izotópokkal való speciális laboratóriumi műveletek, beleértve a nyitott radioaktív izotópokkal végzett műveleteket. A radioaktív izotópok alkalmazása a nukleáris medicinában, az atomenergetikában, a nukleáris környezetvédelemben. Radioanalitika. Bővített sugárvédelmi ismeretek.

A képzéshez kapcsolt szakmai gyakorlat követelményei:

A mesterfokozat megszerzéséhez előfeltétel egy legalább 4 hetes szakmai gyakorlat.

Intézményi döntés alapján a korábbi tanulmányok során elvégzett gyakorlat is elismerhető.

Diplomamunka: 30 kredit.

Specializációválasztás a Vegyész mesterszakon

A vegyész mesterképzésben négyféle oklevél szerezhető, amelyek mindegyike kielégíti a „**Chemistry EuroMaster**” diploma-követelményeit.

Vegyész mesterszak (általános képzettség, specializáció nélkül)

Vegyész mesterszak – analitikus vegyész specializáció

Vegyész mesterszak – szintetikus vegyész specializáció

Vegyész mesterszak – radiokémikus vegyész specializáció

A tehetség önálló kibontakoztatását, az egyéni érdeklődés speciális fejlesztését illetve egyedi igények kielégítését szolgálhatja a **Vegyész mesterszak (általános képzettség, specializáció nélkül)** képzettség megszerzése. Ez esetben a törzsanyagban foglalt biztos kémiai ismeretek megszerzése mellett (48 kredit) viszonylag nagy arányban (max. 30 kredit) szabadon választhat egyéb, de a szakmához szorosan kapcsolódó kémiai és kisebb hányadban egyéb természettudományos tárgyakat a hallgató. (Választható tárgyként csak MSc képzésekben szereplő, tehát MSc kódú tárgyakat lehet teljesíteni!) Ezáltal szélesítheti látókörét, megismerheti a kémiának a lehetséges legváltozatosabb területeken való alkalmazási lehetőségeit, valamint esetleg könnyebben megvalósíthat kisebb-nagyobb mértékű pályamódosításokat is.

A **Vegyész mesterszak – analitikus vegyész specializációjú** képzés során a specializációt választó hallgatók az általános vegyész mesterképzési kurzus ismereteire alapozva modern, a későbbi munkakörük konkrét elvárásai szerint konvertálható analitikai kémiai ismeretekre tesznek szert. Felkészültségük alkalmassá teszi őket arra, hogy bármilyen rutinjellegű, fejlesztő vagy alapkutatást végző analitikai kémiai laboratóriumban részt vegyenek a szakmai követelményeket és a minőségbiztosítási igényeket maximálisan kielégítő munka szervezésében, vezetésében. A képzés során azoknak a készségeknek a kifejlesztésére kerül sor, melyekkel felvértezve az analitikus szakvegyész részt tud venni az általános, valamint az alkalmazási területtől függően esetenként speciális analitikai módszerek adaptálásának, kidolgozásának, validálásának és akkreditálásának irányításában.

A **Vegyész mesterszak – szintetikus vegyész specializációjú** képzés célja elsődlegesen a szerves vegyületek szintézisére, kiemelten a biológiailag aktív vegyületek (gyógyszerek, növényvédőszer) kutatására, fejlesztésére és gyártására, illetve a polimerek előállítására, karakterizálására és gyártásuk optimalizálására képes szakemberek kibocsátása. A diplomát megszerző szakemberek rendelkeznek azokkal a specifikus elméleti és gyakorlati ismeretekkel, amik lehetővé teszik számukra a kommunikációt és a produktív együttműködést a szakterületen dolgozó többi szakemberrel (biológusokkal, farmakológusokkal, mérnökökkel, gyártás-irányítókkal), illetve képessé teszik őket arra, hogy a megszerzett tudásuk birtokában kutató-fejlesztő, analitikai, minőségellenőrző és szervező-minőségbiztosító feladatköröket lássanak el. A képzés nagy figyelmet fordít a szintetikus és gyártási tevékenység elengedhetetlen részét képező, a terület sajátosságait szem előtt tartó szerkezetfelderítési, tisztaságellenőrzési analitikai ismeretek átadására, az ezzel kapcsolatos képességek készségszintre való fejlesztésére.

A **Vegyész mesterszak – radiokémikus specializációjú** képzés célja olyan okleveles vegyészek kibocsátása, akik ismerik a radioaktív izotópokkal való speciális laboratóriumi munka fázisait, beleértve a nyitott radioaktív izotópokkal végzett műveletek alapvető szabályait. A képzés során a specializációt választó hallgatók az általános vegyész

mesterképzési kurzus ismereteire alapozva modern, a későbbi munkakörük konkrét elvárásai szerint konvertálható radiokémiai ismeretekre tesznek szert. Felkészültségük alkalmassá teszi őket arra, hogy a sugárvédelmi szabályok ismeretében biztonságosan szakmai munkát végezzenek bármilyen rutinjellegű, fejlesztő vagy alapkutatást végző izotóplaboratóriumban. A képzés alatt olyan ismeretekre tesznek szert, melyekkel felvértézve a radiokémikus részt tud venni az általános, valamint az alkalmazási területtől függően esetenként speciális feladatokban, módszereket tud adaptálni, kidolgozni. Hatékonyan tudja segíteni az izotóplaboratóriumokban dolgozó egyéb (nem kémikus) szakemberek munkáját, különös tekintettel a nukleáris medicina feladatira. A képzés során a hallgatók az izotóplaboratóriumokban végzett munkához szükséges bővített sugárvédelmi bizonyítványt is szereznek.

Specializáció választás szabályozása: A jelentkezés során a hallgatók két specializációt jelölhetnek meg. A felvételi sorrendet a következő szekvenális szabály alkalmazásával állítjuk fel:

1. Felvételi pontszám.
2. Kémia BSc-n teljesített vegyész specializáció
3. Magasabb összesített kredit index.

Aki az első helyen megjelölt specializációra túljelentkezés miatt nem nyer felvételt, az a második helyen megjelölt specializáción, vagy a specializáció nélküli specializáción folytathatja tanulmányait!

Specializáció létszámok 50 fős államilag finanszírozott keretszám esetén:

analitikus: max. 24 fő

szintetikus max. 18 fő

radiokémikus: max. 8 fő

Azon hallgatónak, akiknek 15 kredit vagy annál több pótlendő tárgya van, a specializáció felvételét nem javasoljuk.

A Vegyész mesterképzési szak (MSc) tantervének szerkezete (1. táblázat)

Tantárgycsoport	Kredit	
	MSc + BSc (előírás)	MSc (teljesítés)
<i>Nem szakmai szabadon választható</i>		6
<i>Természettudományos alapismeretek</i>		
Matematika	12	
Fizika	9	
Kémiai informatika	4	
Bio-Geo	5	
Összes	30	6^a
<i>Szakmai törzsanyag</i>		
Ebből: szervetlen kémia		9
fizikai kémia		11
szerves kémia		12
analitikai kémia		10
műszaki kémia		6
Összes		48
<i>Differenciált szakmai ismeretek</i>		30
Ebből: specializáció		30
<i>Diplomamunka</i>		30
Összes		120

^a Azoknál a tárgyaknál, ahol az MSc+BSc-n összesen teljesítendő kreditnél (I. oszlop) a BSc-n kevesebb a teljesített kreditek száma, a hiányzó krediteket a 2. táblázat megfelelő tárgyainak teljesítésével kell pótolni.

- Ha az így szerzett kreditek meghaladják a 6 kreditet, a többlet a szabadon választható kreditekhez számítható.
- Ha az így szerzett kreditek nem érik el a 6 kreditet (de a BSc+MSc-n előírt feltétel már teljesült), akkor a hiányzó kreditek bármilyen választható MSc-s kódú, természettudományos vagy kémiai tárgy teljesítésével szerezhetők meg.

A Vegyész mesterszak tantervi hálói

I. Nappali tagozat

2. Táblázat: Természettudományos alapismeretek (BSc + MSc összesen 31 kredit):

Tantárgy neve	Tantárgy kódja	Óraszám (E+S+G) számonkérés	Előfeltétel	Kredit
Anyagvizsgálati módszerek	TFME0411	2K+0+0	min. 6 kredit fizika	3
Elméleti atom és molekulafizika	TFME0212	2K+0+0	min. 6 kredit fizika	3
Számítógépes kvantumkémia	TKMG0902	0+3G+0	min. 12 kredit matematika	2
Felületfizika	TFME0991	2K+0+0	min. 9 kredit fizika	3
Fém- és kerámiatan	TFME0992	2K+0+0	min. 9 kredit fizika	3
Kristálytan	TKME1124	2K+0+0	nincs	3

Megjegyzés: E+S+G: előadás + szeminárium + gyakorlat óraszama

K: kollokvium

G: gyakorlati jegy

A: aláírás

3. Táblázat: Szakmai törzsanyag (kötelező 48 kredit):

Tantárgy neve	Tantárgy kódja	Óraszám/félév				kredit
		I.	II.	III.	IV.	
Szervetlen kémia: 9 kredit						
Bioszervetlen kémia	TKME0203	2K+0+0				3
Elemorganikus kémia	TKME0205	2K+0+0				3
Szervetlen kémia gyakorlat II:	TKML0201		0+0+4G			3
Fizikai kémia (a radiokémiát, kolloidkémiát és kvantumkémiát is beleértve): 11 kredit						
Elméleti fizikai kémia I.	TKME0401	2K+0+0				3
Elméleti fizikai kémia II. ^a	TKME0402		2K+0+0			3
Haladó fizikai kémiai gyakorlat I.	TKML0405	0+0+4G				3
Haladó fizikai kémiai gyakorlat II.	TKML0406		0+0+2G			2
Szerves és biokémia: 12 kredit						
Szerves szintézisek I.	TKME0301	2K+0+0				3
Szerves szintézisek II.	TKML0303		0+1A+3G			3
Heterociklusok	TKME0327		2K+0+0			3
Bioreguláció	TKME0303			2K+0+0		3
Analitikai kémia és szerkezetvizsgáló módszerek: 10 kredit						
Műszeres analitika	TKME0501		2K+0+0			3
Szerkezetvizsgáló módszerek	TKME0502		2K+0+0			3
Műszeres analitika gyakorlat	TKML0501			0+0+3G		2
Szerkezetvizsgáló módszerek gyakorlat	TKML0502			0+0+3G		2

Műszaki kémia: 6 kredit						
A vegyészmérnöki tudomány alapjai	TKME0601		2K+0+0			3
Válogatott fejezetek a kémiai technológiából	TKME0602			2K+0+0		3

Megjegyzések:

^a Előfeltétel: Elméleti fizikai kémia I. (TKME0401) sikeres teljesítése

4. Táblázat: Szabadon választható szakmai tárgyak (max. 30 kredit)

Tantárgy neve	Tantárgy kódja	Óraszám (E+S+G) számonkérés	Kredit
Matematikai módszerek a kémiában és a vegyészmérnöki tudományban	TKME0904	2K+0+0	3
Alkalmazott koord.kémia	TKME0211	2K+0+0	3
Makrociklusos ligandumok komplexei	TKME0212	2K+0+0	3
Koordinációs kémia	TKME0204	2K+0+0	3
Veszélyes és különleges anyagok	TKME0206	2K+0+0	3
Biokolloidika	TKME0411	2K+0+0	3
Víz-kémia és vízanalitika	TKME0551	2K+0+0	3
Dinamikus NMR	TKME0415	2K+0+0	3
Sugáregészségügy, sugárvédelem	TKME0416	2K+0+0	3
Élő rendszerek fizikai kémiája	TKME0417	2K+0+0	3
Elméleti fizikai kémiai feladatok	TKMG0418	0+2G +0	2
Komplekxkat. szerves szint.	TKME0420	2K+0+0	3
Környezeti kémia II.	TKME0414	2K+1+1	4
Röntgendiffrakciós szerkezetvizsgálat	TKME0423	2K+0+0	3
Mikrohullámú kémia	TKME0424	4K+0+0	4
Bevezetés a nemlináris kémiai dinamikába	TKME0425	2K+0+0	3
Másodlagos természetes anyagok I.	TKME0331	2K+0+0	3
Másodlagos természetes anyagok II.	TKML0332	0+0+4G	3
Gyógyszerhatóanyagok fejlesztése	TKML0326	0+0+4G	3
Enzimtechnológia	TKME0334_1	2K+0+0	3
Biokémia II.	TKME0335	2K+0+0	3
Biokémia III.	TKML0336	0+0+3G	3
Biokémia III.	TKMG0336	0+1A+0	0
Szakmai nyelvhasználat	TKML1000	0+0+4G	3
NMR operátori gyakorlat	TKML0004	0+0+2G	2
Reakciókinetika/Katalízis	TKME0437	2K+0+2G	4
Redox biokémia. Reaktív Oxigén Származékok (ROS) képződése és szerepe biológiai rendszerekben	TKME0340	2K+0+0	3
Molekulamodellezés és molekuláris szimulációk	TKMG0380	1+2G+0	3
LYX alapú tudományos/műszaki szövegszerkesztés	TKMG0916	0+0+2G	2
A gyógyszerhatás kémiai alapjai	TKME0347	2K+0+0	3
Professional communication in english ^a	TKMG0701	0+4G+0	4

Szakmai angol nyelvű előadás I. ^{a,b}	TKME0712	3K+0+0	3
Szakmai angol nyelvű előadás II. ^{a,b}	TKME0713	3K+0+0	3
Szakmai angol nyelvű előadás III. ^{a,b}	TKME0714	2K+0+0	2
Szakmai angol nyelvű előadás IV. ^{a,b}	TKME0705	2K+0+0	2
Intézményen kívüli gyakorlat ^c	TKMG0043	6 hét	1

^a Ezen tárgyakból a választható kreditek terhére maximálisan **8** kredit számolható el.

^b Gyógyszerész és vegyészmérnök képzésben angol nyelven tartott 2, illetve 3 órás előadások kötelező hallgatása és a hozzátartozó kollokvium angol nyelven (az oktatóval egyeztetve)

^c Azon hallgatóknak, akik a BSc képzésük során intézményen kívüli gyakorlaton nem vettek részt kötelező a tárgy teljesítése.

5. táblázat: Az analitikus vegyész specializáció kötelező és választható tárgyai (30 kredit)

Tárgy neve	kódja	II. félév	III. félév	IV. félév	Kredit
Kötelező tárgyak					21
Kemometria	TKME0511 -14	2K+0+0			3
Analitikai minőségbiztosítás	TKME0513 -14			1K+0+0	1
Modern tömegspektrometria	TKME0317 -14			2K+1+1	4
Modern gáz- és folyadékkromatográfia	TKME0315	2K+0+0			3
Modern gáz- és folyadék-kromatogr. eljárások (gyak.)	TKML0315		0+0+4G		3
A környezetanalitika szerves kémiai módszerei	TKME0235		1K+0+0		1
A környezetanalitika szervetlen kémiai módszerei	TKML0202		0+0+4G		3
Elektroforetikus módszerek	TKME0529			2K+0+0	3
Választható tárgyak					9
Élelmiszeranalitika	TKME0521			2K+0+0	3
Mintavétel, mintaelőkészítés analitikai tesztek ^a	TKME0514	1A+0+0			0
Mintavétel, mintaelőkészítés analitikai tesztek ^a	TKML0514	0+0+4G			4
Nanotechnológia	TFME0990			2K+0+0	3
Radioanalitika	TKME0523		2K+0+0		3
Atomabszorpció ^a	TKME0506			2K+0+0	3
Komplexxémiai vizsgáló módszerek	TKML0215	0+0+4			3

A folyadékkromatográfia alapjai – gyógyszeripari alkalmazások	TKME0310	2+0+0			3
Folyadékkromatográfiás laboratóriumi gyakorlat	TKML0310	0+0+04			3
A gyógyszergyártás minőségellenőrzése és analitikája	TKML0531		0+0+4G		3
NMR operátori gyakorlat II. ^b	TKML0530		0+0+2G		2

^a A tárgy BSc szinten is teljesíthető, azonban BSc-MSc szinten csak egyszer!

^b A tárgy előfeltétele: TKBL0004 vagy TKML0004 – NMR operátor (kezdő))

6. táblázat: A szintetikus vegyész specializáció kötelező és választható tárgyai (30 kredit)

Tárgy neve	kódja	II. félév	III. félév	IV. félév	Kredit
Kötelező tárgyak					27
Reakciómechanizmusok	TKME0311	2K+0+0			3
Aszimmetriás szintézisek	TKME0312		2K+0+0		3
Modern szintézismódszerek a polimerkémiaiában	TKME0313		2K+0+0		3
A farmakológia alapvonalai	TKME0314	2K+0+0			3
Modern gáz- és folyadék- kromatogr. eljárások (elm.)	TKME0315	2K+0+0			3
Modern gáz- és folyadék- kromatogr. eljárások (gyak.)	TKML0315		0+0+4G		3
Modern tömegspektrometria	TKME0317- 14			2K+1+1	4
Nagy hatékonyságú szintézisteknikák	TKML0317			0+0+3G	3
Nagy hatékonyságú szintézisteknikák	TKMG0317			0+1A+0	0
2D NMR módszerek ^{a,b}	TKMG0318 TKML0318		0+2A+2G		3
NMR operátori gyakorlat II. ^{a,b}	TKML0530		0+0+2G		2
Választható tárgyak					3
Glikobiokémia	TKME0321			2K+0+0	3
Molekulatervezés	TKME0322			2K+0+0	3
Szénhidrátkémia	TKME0323			2K+0+0	3
Növényvédőszerkémiája	TKME0324			2K+0+0	3

^a A két kurzus közül az egyiknek a teljesítése a kötelező

^b előfeltétel: TKBL0004 vagy TKML0004 – NMR operátor (kezdő))

7. táblázat: A radiokémikus specializáció kötelező és választható tárgyai (30 kredit)

Tárgy neve	kódja	II. félév	III. félév	IV. félév	Kredit
Kötelező tárgyak					24
Radiokémia	TKME0410	2K+0+0			3
Nukleáris környezetvédelem	TKME0426	2K+0+0			3
Radioaktív izotópok alkalmazásai	TKME0429		2K+0+0		3
Radioanalitika	TKME0523 TKML0523		2K+0+0 0+0+3G+ üzem- látogatás		3 2
Radioaktív izotópok előállítása	TKML0437		1+0+1G		3
Jelzett vegyületek elválasztástechnikája	TKME0431 TKML0431		2K+0+0 0+0+2G		3 1
Dozimetria, sugáregészségügy	TKME0432	2K+0+0			3
Választható tárgyak					6
Nukleáris analitikai módszerek a környezetkutatásban	TKME0433 TKML0433			2K+0+0 0+0+1G	3 1
Radioaktív jelzett vegyületek az orvosbiológiában	TKME0434			2K+0+0	3
Radioaktív gyógyszerek előállítása és minőség ellenőrzése	TKML0435			0+0+2G	2
Sejt- és szöveti anyagcsere vizsgálata radiokémiai módszerekkel	TKME0436			2K+0+0	3
Radiokémiai alapmérések (kötelező azoknak a hallgatóknak, akik ezt, vagy a Radioaktív izotópok alkalmazása a vegyiparban tárgyat nem teljesítették BSc-ben)	TKML0415	0+0+1G			1

II. Levelező tagozat

A tanterv összeállításánál alkalmazott alapelvek:

1. A nappali és levelező tagozat alapvetően ugyanazon tantervi programmon alapul. A képzési idő **4 félév**, amely alatt összesen **120 kredit** teljesítendő. A kötelező és választható kreditek aránya és az egyéb tantervi előírások megfelelnek a nappali tagozaton rögzített előírásoknak

2. A levelező tagozaton **nincsenek önálló specializációk**.

3. A felvétel feltételei a nappali és levelező tagozat esetén ugyanazok.

4. A nem specializációjú továbbtanulás esetén előírt **pótlások** (maximum 30 kredit lehet) a levelező **vegyésszmérnök BSc képzés** tárgyainak felvételével teljesíthetők.

5. A levelező vegyész MSc képzés választható tárgyait lehetőség szerint úgy kell meghirdetni, hogy arra az I. és II. évfolyam egyszerre jelentkezhesen (A tárgyakat vagy csak az őszi vagy csak a tavaszi félévben hirdetjük meg.).

6. A választható levelező kurzusokra a hallgatók már az előző félévi szorgalmi időszakban jelentkeznek, és az egyes kurzusok csak egy rögzített minimumnál nagyobb létszám (pl. 6-10 fő) esetén indulnak.

7. Az első félévben a választható tárgyak körét szeptemberben rögzítjük.

8. A konzultációk óraszámának megállapításánál az előírt jogszabályokat követjük. Ennek megfelelően egy a nappali tagozaton heti 2 órás 3 kredites tárgy konzultációs órászáma 2-3 óra/kredit, célszerűen 8 óra/félév, míg egy gyakorlatnál 4-5 óra/ kredit, azaz 10-24 óra/félév (2-5 kreditre vetítve).

9. A konzultációk/gyakorlatok célszerű szervezési módja:

- elmélet: 3 kredit: 8 óra = 2 x 4 óra/félév
- gyakorlat: 2 kredit: 10 óra = 2 x 5 óra
- 3 kredit: 15 óra = 3 x 5 óra
- 4 kredit: 20 óra = 2 x 6 + 8 óra
- 5 kredit: 24 óra = 3 x 8 vagy 4 x 6 óra

10. A diplomamunka készítésére a jelentkezés a II. félévben esedékes.

11. A záróvizsga lebonyolítása a nappali tagozaton alkalmazott eljárás szerint történik.

8. táblázat: A levelező vegyész MSc képzés tantervi hálójának féléves bontásban

Tantárgy neve	Kódja	Konzultációs óraszám/ számonkérés	Kredit
I. félév			
Kötelező tárgyak			14
Bioszervetlen kémia	TKME0203_L	8K	3
Elméleti fizikai kémia I.	TKME0401_L	8K	3
Haladó fizikai kémia labor. gyak.	TKML0403_L	24G	5
Szerves kémia szintézismódszerek I.	TKME0301_L	8K	3
Választható tárgyak köre (és/vagy pótlások)			16
Koordinációs kémia	TKME0204_L	8K	3
Elemorganikus kémia	TKME0205_L	8K	3
Veszélyes és különleges anyagok	TKME0206_L	8K	3
Biokolloidika	TKME0411_L	8K	3
Anyagvizsgálati módszerek (fizika)	TFME0411_L	8K	3
Elméleti atom- és molekulafizika	TFME0212_L	8K	3
A kémia története	TKME0207_L	8K	3
Másodlagos természetes anyagok I.	TKME0331_L	8K	3
Másodlagos természetes anyagok II.	TKML0332_L	15Gy	3

II. félév			
Kötelező tárgyak			19
Elméleti fizikai kémia II.	TKME0402_L	8K	3
Szervetlen kémia gyakorlat II.	TKML0201_L	15G	3
Szerves kémia szintézismódszerek II.	TKML0302_L	20G	4
Műszeres analitika	TKME0501_L	8K	3
Szerkezetvizsgáló módszerek	TKME0502_L	8K	3
Vegyésmérnöki tud. alapjai	TKME0601_L	8K	3
Választható tárgyak köre (és/vagy pótlások)			11
Környezetanalitika (szervetlen)	TKML0503_L	4+16G	4
Környezetanalitika (szerves)	TKML0504_L	4+16G	4
Élő rendszerek fizikai kémiája	TKME0417_L	8K	3
Felületfizika	TFME0991_L	8K	3
Fém és kerámiatan	TFME0992_L	8K	3
Röntgendiffrakció	TKME0423_L	8K	3
Kirotikai spektroszkópia	TKME0333_L	8K	3
Szénhidrátkémia	TKME0323_L	8K	3

III. félév			
Kötelező tárgyak			25
Diplomamunka I.	TKML0001_L	75G	15
Bioreguláció	TKME0303_L	8K	3
Szerkezetvizsgálat gyakorlat	TKML0502_L	10G	2
Műszeres analitika gyakorlat	TKML0501_L	10G	2
Válogatott fej. kém. techn.	TKME0602_L	8K	3
Választható tárgyak köre (és/vagy pótlások)			5
Enzimtechnológia	TKME0334_L	8K	3
Kemometria I.	TKME0511_L	8K	3
Analitikai minőségbiztosítás	TKME0513_L	8K	3
Növényvédőszer kémiaja	TKME0324_L	8K	3
IV. félév			
Kötelező tárgyak			15
Diplomamunka II.	TKML0002_L	75G	15
Választható tárgyak köre (és/vagy pótlások)			15
Kemometria II.	TKME0512_L	8K	3
Atomspektroszkópia	TKME0516_L	8K	3
Kapilláris elektroforézis	TKME0529_L	8K	3
Radioanalitika	TKME0523_L	8K	3
Reakciómechanizmusok	TKME0311_L	8K	3
Komplekkatalizált szerves szint.	TKME0420_L	8K	3
Aszimmetriás szintézisek	TKME0312_L	8K	3
Modern tömegspektrometria	TKME0316_L	8K	3
Modern HPLC	TKME0532_L	8K	3
Glikobiokémia	TKME0321_L	8K	3
Művelettani laborgyakorlat	TKML0611_L	15G	3

Tantárgyi programok

1. Természettudományos alapismeretek

ANYAGVIZSGÁLATI MÓDSZEREK

Tantárgyfelelős: Daróczi Lajos

A tárgy oktatója: Daróczi Lajos

Óraszám/hét: 2

Kreditszám: 3

Számonkérés módja: kollokvium

Javasolt előtanulmány: BSc Fizikai kémia, BSc Anyagszerkezet

Tematika: (a kurzus célja, rövid tematikája)

A kurzus célja, hogy áttekintést adjon az anyagvizsgálat fizikai és kémiai módszereiről, ezen belül megismertesse a kémia szakos hallgatókat a fizika és mérnöki tudomány néhány speciális módszerével is.

Mechanikai anyagvizsgálati módszerek: szakítóvizsgálat, hajlítóvizsgálat, keménységmérési módszerek, törési-fáradási jelenségek vizsgálata; ütőmunka mérése, fárasztóvizsgálat, repedésvizsgálati eljárások; mágneses, röntgen, ultrahangos repedésvizsgálat. Mikroszkópikus módszerek: optikai mikroszkópia, pásztázó és transzmissziós elektronmikroszkópia, pásztázó alagút és atomerő mikroszkópia, térion és térelektron mikroszkópia. Mágneses anyagok vizsgálati módszerei: mágnesezettség mérési módszerei, magnetométerek, doménszerkezet vizsgálata: Bitter-módszer, Kerr-mikroszkópia, Barkhausen-zajmérés. Kémiai összetétel vizsgálati módszerei: optikai és röntgenspektroszkópiái módszerek, tömegspektroszkópiái eljárások; SIMS, SNMS, elektronspektroszkópiái módszerek EELS, ESCA, stb. Diffrakciós módszerek: röntgen, elektron, neutron diffrakció

Ajánlott irodalom:

1. Harangozó István-Patkó József: Kísérleti atom-és molekulafizika, egyetemi jegyzet KLTE Szft. 1986
2. Pozsgai Imre: Pásztázó elektronmikroszkópia és elektronsugaras mikroanalízis alapjai, egyetemi jegyzet 1994
3. Radnóczy György: A transzmissziós elektronmikroszkópia és elektrondiffrakció alapjai, egyetemi jegyzet KLTE Szft. 1994
4. D.B. Williams, C. B. Carter: Transmission electron microscopy I-IV. Plenum Press New York 1996
5. C. Giacovazzo et al.: Fundamentals of Crystallography, Oxford University Press 1992.

ELMÉLETI ATOM- ÉS MOLEKULAFIZIKA

Tantárgyfelelős: Vibók Ágnes

A tárgy oktatója: Vibók Ágnes

Óraszám/hét: 2

Kreditszám: 3

Számonkérés módja: kollokvium

Javasolt előtanulmány: BSc Fizikai kémia, BSc Anyagszerkezet

Tematika: (a kurzus célja, rövid tematikája)

A kurzus célja, hogy bemutassa az atomok és molekulák kvantummechanikai leírásának általános elveit és módszereit, elősegítve ezzel a kémiai átalakulások értelmezését és a speciális kvantumkémiai módszerek elsajátítását is.

Az atomok és molekulák szerkezetének kvantumelmélete. Szabad atomok és molekulák Schrödinger egyenlete. Born-Oppenheimer és adiabatikus közelítés. Hellmann-Feynman tétel. Viriáltétel. Variációs elv, variációs módszerek. Perturbációs módszerek. Hullámfüggvények. Determináns hullámfüggvények közötti mátrixok. Sokelektromos hullámfüggvények. Hartree-Fock módszer. Az elektronkorreláció és számítására alkalmas közelítő módszerek. Az atomok elektronállapotai. Az LS- és jj-csatolás. Atomok elektromos és mágneses térben. Kiválasztási szabályok. Molekulák elektronállapotainak osztályozása. Molekulák elektromos és mágneses térben. Molekulaszínképek.

Ajánlott irodalom:

1. Antal János: fizikai kézikönyv műszakiaknak, Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1980.
2. Kapuy Ede és Török Ferenc: Az atomok és molekulák kvantumelmélete, Akadémiai Kiadó, Budapest, 1975.
3. L. A. Gribov, M. A. Jeljasevics, B. I. Sztyepanov és M.V. Volkenstein: Molekularezgések, Akadémiai Kiadó, Budapest 1979.
4. D. R. Yarkony: Modern Electronic Structure Theory, World Scientific, 1995.
5. I. Mayer: Simple Theorems, Proofs, and Derivations in Quantum Chemistry, Kluwer Academic, 2003.

SZÁMÍTÓGÉPES KVANTUMKÉMIAI GYAKORLATOK

Tantárgyfelelős: Purgel Mihály

A tárgy oktatója: Purgel Mihály

Óraszám/hét: 0+3+0

Kreditszám: 2

Számonkérés módja: gyakorlati jegy

Javasolt előtanulmány: BSc Anyagszerkezet, Elméleti kémia alapjai

Tematika: (a kurzus célja, rövid tematikája)

A tantárgy alapvető célja a korábbi, elméleti kollégiumok során megismert modern kvantumkémiai módszerek számítógépes alkalmazásának elsajátítása. A gyakorlat során a hallgatók megismerkednek a kvantumkémiai számítások elvégzésére és értékelésére alkalmas kvantumkémiai szoftverekkel, majd ezeket alkalmazzák különböző problémák elméleti kémiai módszerekkel történő vizsgálatára.

Tematika: molekulák szerkezetének és egyéb jellemzőinek vizsgálata, reakciók termodinamikájának meghatározása, különböző típusú reakciók mechanizmusának tanulmányozása, kondenzált fázisú rendszerek vizsgálata

Ajánlott irodalom:

1. Veszprémi Tamás, Fehér Miklós: *A kvantumkémia alapjai és alkalmazása*, Műszaki Könyvkiadó, 2002.
2. Christopher J. Cramer: *Essentials of Computational Chemistry*, Wiley, 2002.

FELÜLETFIZIKA

Tantárgyfelelős: Erdélyi Gábor

A tárgy oktatója: Erdélyi Gábor

Óraszám/hét: 2

Kreditszám: 3

Számonkérés módja: kollokvium
Javasolt előtanulmány: BSc Fizikai kémia

Tematika: (a kurzus célja, rövid tematikája)

Az anyagtudományban, a nano-technológiában, fontos szerepet játszó felületi jelenségek és folyamatok bemutatása, értelmezése. Kísérleti módszerek és gyakorlati alkalmazások áttekintése.

Határfelületek osztályozása, külső és belső határfelületek, szemcse- és fázishatárok. Felületek elemi krisztallográfiája és termodinamikája. Felületek elemi modelljei, felületi energia, kristályok egyensúlyi alakja, Wulff-tétel.

Kis és nagyszögű szemcsehatárok szerkezete. Speciális szemcsehatárok, szerkezeti modellek, szemcsehatárok energiája. Fázishatárok. Atomi illeszkedési modellek, miszfit koncepció. Koherens, inkoherens fázishatárok.

Jól definiált felületek, vékony filmek előállítása, kinetikai fogalmak, vékony filmek növekedésének modelljei.

Multi-és nanorétegek minősítésének fontosabb kísérleti módszerei. Szegregáció külső és belső felületeken, szegregációs kinetikák.

Felületek hatása az elektronállapotokra, felületek szerepe a vezetési, szórási és mágneses jelenségekben. Fém, félvezető és oxid felületek és fázishatárok, szerepük különböző félvezető, opto-elektronikai, valamint mágneses eszközökben (óriás mágneses ellenállás, spintronika).

Ajánlott irodalom:

1. Dr.Giber J. és szerzőtársai: Szilárdtestek felületfizikája, Műszaki Könyvkiadó, 1987.
2. J. Venebles: Introduction to surface and thin film processes, Cambridge University Press, 2000.
3. K-N Tu, J.W. Mayer, L.C. Feldman: Electronic thin film science, Macmillan Publ. Co., 1992.
4. H. Lüth: Solid surfaces, interfaces and thin films. Springer, 2001.

FÉM- ÉS KERÁMIATAN

Tantárgyfelelős: Erdélyi Gábor

A tárgy oktatója: Erdélyi Gábor

Óraszám/hét: 2

Kreditszám: 3

Számonkérés módja: kollokvium

Javasolt előtanulmány: BSc Fizikai kémia

Tematika: (a kurzus célja, rövid tematikája)

Cél: kristálytani, anyagszerkezeti ismeretekre támaszkodva a tárgy megismerteti a hallgatókat fémek, valamint a szerkezeti és funkcionális kerámiák tulajdonságaival, a bennük lejátszódó folyamatokkal, fontosabb technológiai alkalmazásaikkal.

A fontosabb kerámiák (oxidok, nitridek, karbidok) kristályszerkezete. Az orientáció, szerkezet, textúra-meghatározás kísérleti módszerei. Hibaszerkezetek ionos vegyületekben. Hibák, hibareakciók, hiba-egyensúlyok, Brouwer-diagram, a sztöchiometriai eltérések kompenzációja, kerámiák mint gáz-szenzorok.

Atom és töltéstranszport szilárd fázisban. Diffúzió nem-stöchiometrikus oxidokban. Elektromos vezetőképesség és a hibastruktúra kapcsolata.

Mechanikai tulajdonságok, a plasztikus alakváltozás mechanizmusai, alakítás és keményedés. Újrakristályosodás és szemcsenövekedés. Kristályosodás fémes és nem-fémes rendszerekben.

Kapilláris-jelenségek, szinterelés. Átalakulások szilárd fázisban, spinodális szétválás, Nem –diffúzió kontrollált átalakulások fémekben és kerámiákban.

A fontosabb funkcionális és szerkezeti kerámiák előállítása, a szerkezet változása a technológiai lépések során. Kerámiák szívósságának növelése. A szerkezet, továbbá a mechanikai, termikus, optikai és elektromos tulajdonságok kapcsolata.

Fém-kerámia kötések, kerámia-bázisú társított anyagok, biokompatibilis kerámiák.

Ajánlott irodalom:

1. Chavarria J. Kerámia, Novella Budapest, 1996.
2. Gottstein, G.: Physikalische Grundlagen der Materialkunde, Springer, 2001.
3. Brook, RG.: Concise encyclopedia of advanced ceramic materials, Pergamon, Oxford, 1991.

KRISTÁLYTAN

Tantárgyfelelős: Papp István

A tárgy oktatója: Papp István

Óraszám/hét: 2

Kreditszám: 3

Számonkérés módja: kollokvium

A kurzus célja a kémia több területéhez csatlakozó alapvető kristálytani ismeret elsajátítása. A kristályos anyagfélések morfológiai és bőszerkezeti törvényszerűségeinek tárgyalása a szilárd fázisok fizikai-kémiájának megértését segíti és a térszemlélet kialakítását teszi lehetővé. A kristálytan azért is fontos alapismeret, mert a középiskolai tanulmányok közt nem szerepel.

Rövid tematika: A térrácselmélet. A kristályalaktan törvényei, a morfológiai kristályrendszer. Kristályformák, kombinációk, ikerkristályok. A kristálykémia alapvető törvényszerűségei. Az ion-, atom-, fémes-, és molekulárcsok jellemzése, legfontosabb típusaik ismertetése, elemzése. Az izomorfia, polimorfia törvényszerűségei. A legfontosabb fizikai (kohéziós és optikai) tulajdonságok összefüggése a belső szerkezettel. A polarizációs mikroszkóp.

Ajánlott irodalom:

1. Székyné Dr.Fux Vilma: Kristálytan. ELTE, Budapest, TTK (jegyzet)
2. Dr. Barta István: Kristálytani alapok.(Kristályalaktan). Debreceni Egyetem, TTK (jegyzet)

2. Szakmai törzssanyag

BIOSZERVETLEN KÉMIA

Tantárgyfelelős: Sóvágó Imre

A tárgy oktatója: Sóvágó Imre és Várnagy Katalin

Óraszám/hét: 2+0+0 Periódus: 1. félév

Kreditszám: 3

Számonkérés módja: Kollokvium

Javasolt előtanulmány: Szervetlen kémia I., Szervetlen kémia II. BSc kurzusok teljesítése

Tematika: (a kurzus célja, rövid tematikája)

A tárgy célja: a létfontosságú nyomelemek biológiai szerepének illetve a toxikus szervesetlen vegyületek káros hatásai molekuláris alapjainak megismerése.

A tárgy tartalma: A biológiai rendszerek elemi összetétele és az elemek csoportosítása élettani hatásuk szerint. A létfontosságú elemek biológiai szerepének általános tárgyalása. A biológiailag fontos ligandumok (aminosavak, peptidek, fehérjék, nukleinsavak, porfirinvas vegyületek) komplexképző sajátosságai, metalloproteinek és metalloenzimek tulajdonságai. Az alkálifémek és alkáliföldfémek szerepe biológiai rendszerekben. Kationmegoszlás, transzportfolyamatok. Az oxigénmolekula tárolása, szállítása és aktiválása. A vas és a réz biológiai szerepének csoportosítása, részvételük a biológiai oxidációs folyamatokban. A cink biológiai szerepe, fontosabb cinktartalmú enzimek. Az egyéb nyomelemek (molibdén, mangán, kobalt, vanádium, szilícium, króm, szelén, stb.) biológiai szerepének tárgyalása. A bioszervesetlen kémiai ismeretek gyógyászati és környezetvédelmi alkalmazásai.

Ajánlott irodalom:

1. S.J. Lippard, J.M. Berg, Principles of Bioinorganic Chemistry, University Science Books, Mill Valley, CA 1994.
2. Gergely Pál: Általános és bioszervesetlen kémia, Semmelweis Kiadó, Budapest, 2001.
3. E.I. Ochiai, General Principles of Biochemistry of the Elements, Plenum Press, New York, London (1987).

ELEMORGANIKUS KÉMIA

Tantárgyfelelős: Buglyó Péter

A tárgy oktatója: Buglyó Péter

Óraszám/hét: 2+0+0 Periódus: 1. félév

Kreditszám: 3

Számonkérés módja: Kollokvium

Javasolt előtanulmány: Szervesetlen kémia II., Szerves kémia I. BSc. kurzusok teljesítése

Tematika: (a kurzus célja, rövid tematikája)

Az előadás tematikája két részre tagolódik: az első részben az elemorganikus kémiával foglalkozunk. Ezen belül a vegyületek általános jellemzése után részletesebben foglalkozunk a Li, Mg, B, Al, Si és Hg organikus vegyületeivel, míg a Na, Be, Tl, Sn, Pb, Zn és Cd organikus vegyületeinél csak a legjellemzőbb sajátosságokat emeljük ki. Az átmenetifémek kovalens koordinációs vegyületeinek tárgyalásánál elsősorban az átmenetifémek karbonil-, alkil-, olefin- és ciklopentadienil-komplexeivel foglalkozunk, külön kiemelve ezen komplexeknek a katalitikus reakciókban játszott szerepét.

Ajánlott irodalom:

1. Dr. Emri József: Elemorganikus vegyületek kémiája, Kossuth Egyetemi Kiadó, Debrecen, 2004
2. Faigl Ferenc, Kollár László, Kotschy András, Szepes László: Szerves fémvegyületek kémiája, Nemzeti Tankönyvkiadó, Budapest, 2001
3. N.N. Greenwood, A. Earnshaw, Az elemek kémiája I-III. NTK, 2004.

SZERVETLEN KÉMIA GYAKORLAT II.

Tantárgyfelelős: Buglyó Péter

A tárgy oktatója: Buglyó Péter, Lázár István, Tóth Imre

Óraszám/hét: 0+0+4 Periódus: 2. félév

Kreditszám: 3

Számonkérés módja: Gyakorlati jegy

Javasolt előtanulmány: Szervetlen kémia I. (gyakorlat), Analitikai kémia III. BSc. kurzusok teljesítése

Tematika: (a kurzus célja, rövid tematikája)

A tárgy célja, hogy a Szervetlen kémia I. és Analitikai kémia III. gyakorlatokon elsajátított ismeretekre támaszkodva bevezessen a modern szintetikus-preparatív kémiai gyakorlatba. A gyakorlat során alacsony és magas hőmérsékleten, csökkentett vagy túlnyomáson, víz- és/vagy oxigénmentes oldószerekben, anaerób körülmények között végmenő stb. reakciókkal nemfémes és fémvegyületek előállítása történik. A szintetizált vegyületek szerkezete, tulajdonságai különböző műszeres módszerekkel kerülnek tanulmányozásra.

Ajánlott irodalom:

1. N.N. Greenwood, A. Earnshaw, Az elemek kémiája I-III, Tankönyvkiadó, 2004.
2. Lengyel B., Csákvári B., Általános és szervetlen kémiai praktikum II. Tankönyvkiadó.
3. J.D. Woollins, Inorganic Experiments, VCH, 2003.

ELMÉLETI FIZIKAI KÉMIA I-II.

Tantárgyfelelős: Póta György

A tárgy oktatója: Tanszéki munkaközösség (Fizikai Kémiai Tanszék, Kolloid és Környezetkémiai Tanszék)

Óraszám/hét: 2+0+0, 2 félév

Kreditszám: 6

Számonkérés módja: kollokvium félévenként

Javasolt előtanulmány: BSc Fizikai kémia II., a második félévhez a BSc Anyagszerkezet is.

Tematika: (a kurzus célja, rövid tematikája)

A kurzus célja a fizikai kémia néhány haladó fejezetének bemutatása, új módszerek, megközelítési módok ismertetése.

- Az irreverzibilis termodinamika elemei: Erők és áramok, Onsager-relációk, entrópiatermelés, keresztjeffektusok, fizikai és kémiai alkalmazások, a struktúraképződés lehetősége.
- Reakciókinetika: Reaktorok dinamikája, stacionárius állapot és stabilitás. Mozgó reakciófrontok gázokban és oldatokban, transzportfolyamatok és kémiai reakciók együttes tárgyalása. Kaotikus kinetikai jelenségek.
- Elektrokémia: Elektrokémiai kinetika, az áram és a potenciál kapcsolata. Elektrokémiai egyensúly. Az elektrokémiai rendszerek leírása áramkörökkel. Áramforrások, környezetvédelmi vonatkozások.
- Felületi jelenségek: Mechanikájuk és termodinamikájuk, adszorpció, a felületek modern vizsgálati módszerei. Heterogén katalízis. Nanotechnológiai fogalmak, alkalmazások.
- Bio-fizikai kémia: Az élő szervezetek anyagcseréjének termodinamikája, a bennük lejátszódó transzportfolyamatok és szabályozási jelenségek bizonyos típusainak fizikai kémiai leírása. Makromolekulák és biológiai hatásaik.
- Kvantumkémiai alkalmazások: A legfontosabb kvantumkémiai módszerek (HF-elektronkorrelációs, szemempirikus és DFT módszerek) áttekintése. Molekulák szerkezeti jellemzőinek (molekulageometria, energia, normálrezgések,

elektronsűrűséggel kapcsolatos paraméterek) meghatározása. Kémiai reakciók termodinamikájának és mechanizmusának tanulmányozása. A potenciálisenergia-hiperfelület vizsgálata.

- Izotópia: Izotópeffektusok termodinamikája. A magsugárzás és az anyag kölcsönhatásainak kvantitatív értelmezése. Elvileg lehetséges magreakciók áttekintése, megvalósítása. A nukleáris energiatermelés környezetvédelmi problémái: radioaktív izotópok kémiai formái a természeti környezetben.

Ajánlott irodalom:

1. P. W. Atkins: Fizikai kémia III, NTK, Bp. 2002
2. Bazsa György (szerk.): Nemlineáris dinamika és egzotikus kinetikai jelenségek kémiai rendszerekben, egyetemi jegyzet, Debrecen ; Budapest ; Gödöllő, 1992
3. Inzelt György: Az elektrokémia korszerű elmélete és módszerei I-II. NTK Bp. 1999.
4. Rohrsetzer Sándor (szerk.) Kolloidika, Tankönyvkiadó Budapest, 1991.
5. Nagy Lajos György, Nagyné László Krisztina: Radiokémia és izotóptechnika, Műegyetemi kiadó, 1977.

HALADÓ FIZIKAI KÉMIAI LABORATÓRIUMI GYAKORLATOK

Tantárgyfelelős: Bényei Attila

A tárgy oktatója: Bényei Attila, Gáspár Vilmos, M. Nagy Noémi, Berka Márta

Óraszám/hét: 6 óra

Kreditszám: 5

Számonkérés módja: gyakorlati jegy

Javasolt előtanulmány: Elméleti Fizikai Kémia I (párhuzamos felvétel)

Tematika: (a kurzus célja, rövid tematikája)

A gyakorlatok témakörének nagyobbik része (termodinamikai mennyiségek mérése, oldat- és fázisegyensúlyok vizsgálata, elektrokémiai és reakciókinetikai vizsgálatok) megegyezik a BSc Fizikai kémiai laboratóriumi gyakorlatok c. tárgyban megadottal, de a./ nehezebben kivitelezhető, összetettebb feladatokkal találkozhat a hallgató b./ hangsúlyt kap a kísérletterv valamint a mérési adatok hatékonyabb feldolgozását elősegítő, egyszerűbb számítógépes programok önálló elkészítése.

Sorra kerülnek radio- (1./ Homogén izotópcsere vizsgálata etil-jodid- ^{131}I - rendszerben 2./ ^{212}Pb - ^{212}Bi anya-leány elempár elektrokémiai elválasztása) és kolloidkémiai (méretmeghatározás oldatban valamint felületi tulajdonságok, felületi aktivitás vizsgálata) gyakorlatok is.

Ajánlott irodalom:

1. Kathó Ágnes, Rábai Gyula, Berka Márta: Fizikai kémiai laboratóriumi gyakorlat III. Debreceni Egyetemi kiadó, 2010

SZERVES SZINTÉZISEK I.

Tantárgyfelelős: Vágvölgyiné Tóth Marietta

A tárgy oktatója: Vágvölgyiné Tóth Marietta, Kónya Krisztina

Óraszám/hét: 2 + 0 + 0

Kreditszám: 3

Számonkérés módja: kollokvium

Javasolt periódus: 1

Javasolt előtanulmány: Szerves kémia II, Szerves kémia IV. (Kémia BSc)

Tematika: (a kurzus célja, rövid tematikája)

A tárgy célja megismertetni a hallgatókat a modern szerves kémiai szintézistervezés szintetikus metodológiák alapjaival.

A szerves szintézisek általános jellemzése. A legfontosabb funkciós csoportok kialakításának módszerei, funkciós csoport interkonverziók.

Szintonok fogalma, típusaik. Szintonok alkalmazása szénláncok és karbociklusok szintézisében. Retroszintézis elve, szerves molekulák retroszintetikus analízise.

Védőcsoportok, legfontosabb típusaik, alapvető védési és hasítási technikák.

Bonyolult szerves molekulák felépítésének módszerei. Néhány reprezentatív alkalmazás természetben előforduló származékok esetén.

Ajánlott irodalom:

1. S. Warren, Organic Synthesis: The disconnection Approach, Wiley Chichester, 1982.
2. J. Fuhrhop, G. Penzlin, Organic synthesis, VCH, Weinheim, 1986.
3. T.W. Greene, P.G.M. Wutz, Protective groups in organic synthesis, Wiley, New York, 1986.
4. P.C. Kocienski, Protecting groups, Thieme, Stuttgart, 2004.

SZERVES SZINTÉZISEK II.

Tantárgyfelelős: Vágvölgyiné Tóth Marietta

A tárgy oktatója: Gulácsi Katalin, Juhász László, Juhászné Tóth Éva, Vágvölgyiné Tóth Marietta, Kónya Krisztina

Óraszám/hét: 0 + 1 + 3

Kreditszám: 3

Számonkérés módja: gyakorlati jegy

Javasolt periódus: 2

Javasolt előtanulmány: Szerves kémiai szintézismódszerek I. (Vegyész MSc) vagy Szerves kémia I – III. (kémia BSc)

Tematika: (a kurzus célja, rövid tematikája)

A tárgy célja megismertetni a hallgatókat a modern szerves kémiai szintézistervezés szintetikus metodológiák alapjaival.

A szerves szintézisek általános jellemzése. A legfontosabb funkciós csoportok kialakításának módszerei, funkciós csoport interkonverziók.

Szintonok fogalma, típusaik. Szintonok alkalmazása szénláncok és karbociklusok szintézisében. Retroszintézis elve, szerves molekulák retroszintetikus analízise.

Védőcsoportok, legfontosabb típusaik, alapvető védési és hasítási technikák. Bonyolult szerves molekulák felépítésének módszerei. Néhány reprezentatív alkalmazás természetben előforduló származékok esetén.

Ajánlott irodalom:

1. R.O.C. Norman, J.M. Coxon, Principles of Organic Synthesis, Blackie Academic, 1993.
2. Guo-Qiang Lin, Yue-Ming Li, A.S.C. Chan, Principles and Applications of Asymmetric Synthesis, John Wiley, 2001.
3. D. Mayo, R. Pike, P. Trump, Microscale organic laboratory with multistep and multiscale synthesis, 4th edition John Wiley, 2000.
4. M. Schlosser, Organometallics in Synthesis, John Wiley, 2004.

HETEROCIKLUSOK

Tantárgyfelelős: Kurtán Tibor

A tárgy oktatója: Kurtán Tibor

Óraszám/hét: 2 + 0 + 0

Kreditszám: 3

Számonkérés módja: kollokvium

Javasolt periódus: 3

Javasolt előtanulmány: Szerves kémia I. – III. (Kémia BSc)

Tematika: (a kurzus célja, rövid tematikája)

Tantárgy célja megismertetni hallgatókat a heterociklusos vegyületek alapvető csoportosításával, nevezéktanával, a vegyületek előállításának lehetőségeivel és átalakításaikkal. A kurzus célja, hogy kitekintést nyújtson a heterociklusos vegyületek biológiai szerepébe, gyógyszerkémiail alkalmazásának lehetőségeibe.

Heterociklusos vegyületek csoportosítása és nevezéktana. Oxiránok, tiiránok és aziridinek jellemzése, előállításuk és reakciók. Négytagú egy heteroatomos heterociklusok jellemzése, előállításuk és reakciók. Furán, tiofén, pirrol származékok előállítása és reakciói. Öttagú több heteroatomot tartalmazó heterociklusok jellemzése. Benzol kondenzált öttagú heterociklusok jellemzése. Hattagú, több heteroatomot tartalmazó heterociklusok jellemzése. Héttagú, egy vagy két heteroatomot tartalmazó vegyületek. Flavonoidok képviselői, előállításuk és reakcióik.

Ajánlott irodalom:

1. Thomas. L. Gilchrist; Heterocyclic chemistry; 3rd Edition
2. John A. Joule, Keith Mills; Heterocyclic chemistry, 5th Edition; Wiley and Sons
3. Julio Alvarez-Builla, Juan Jose Vaquero, José Barluenga; Modern Heterocyclic chemistry Vol. 1. – 4.

BIOREGULÁCIÓ

Tantárgyfelelős: Barna Terézia

A tárgy oktatója: Barna Terézia

Óraszám/hét: 2 + 0 + 0

Kreditszám: 3

Számonkérés módja: kollokvium

Javasolt periódus: 1

Javasolt előtanulmány: Biokémia I, Biokémia III. (Kémia BSc)

Tematika: (a kurzus célja, rövid tematikája)

Tantárgy célja megismertetni a hallgatókat a szabályozással kapcsolatos biokémiai folyamatokkal. Bioreguláció molekuláris szinten. Fehérjekonformáció és szabályzás összefüggése. Szabályozás az enzimek szintjén: allosztérikus szabályozás, poszttranszlációs módosulások. Idegrendszeri illetve hormonális szabályozás. Hormonhatás mechanizmusa. Génexpresszió szabályozása, operon szabályozás, splicing, RNS érési folyamatok.

Ajánlott irodalom:

4. Ádám Veronika, Orvosi Biokémia, Medicina, 2002.
5. J.M. Berg, J.M. Tymoczko, L. Stryer, Biochemistry, 5th Edition, W.H. Freeman and Co., 2002.
6. J. Darnell, H. Lodish, D. Baltimore, Molecular cell biology, Scientific American Books, 1986.

MŰSZERES ANALITIKA

Tantárgyfelelős: Gáspár Attila

A tárgy oktatója: Gáspár Attila, Fábián István

Óraszám/hét: 2+0+0 Periódus: 2. félév

Kreditszám: 3

Számonkérés módja: Kollokvium

Javasolt előtanulmány: Analitika II. (BSc)

Tematika: (a kurzus célja, rövid tematikája)

Mintavételi és mintaelőkészítési módszerek. Atomemissziós spektroszkópiai módszerek: atomszerkezet és emissziós színképszerkezet (atom és ionszínképek) összefüggése. Korszerű gerjesztési módszerek az atomspektroszkópiában: egyenáramú és nagyfrekvenciás (ICP) plazmák, lézergerjesztés stb. Újabb optikai leképezési és fényfelbontós módszerek (száloptikák, holografikus rácsok stb.) Detektorrendszerek és jelfeldolgozás (PMT-k, háttérkorrekciók, számítógépes vezérlés és mérés). Atomabszorpciós módszerek: AAS módszerek elve és gyakorlata, sugárforrások (ÜK, EDL), atomforrások (láng, elektrotermikus). Háttérkorrekciós és jelfeldolgozó rendszerek. A tömegspektrometria műszerei és szervesetlen analitikai alkalmazásai: mágneses (Nier-féle), kettős fókuszállású (Herczog-féle) kvadrupol és repülési idő spektrométerek. Ionforrások (elektronbombázásos, kémiai ICP stb.) Molekula (abszorpciós) spektrofotometria és szervesetlen alkalmazásai: UV és látható spektrofotométerek (egy- és kétsugaras rendszerek). Spektrofotometriás analitikai mérési módszerek (differenciál-spektrofotometria, derivatív spektrofotometria stb.).

Elektroanalitika: konduktometria, oszcillometria. Ionszelektív elektródok elmélete, potenciometria. Modern polarográfiás mérőmódszerek. Automatikus analízis: Flow Injection Analysis. Elválasztástechnika: modern planárokromatográfiás technikák, a kvantitatív rétegekromatográfia alapjai. Kapilláris gázkromatográfia, nagyteljesítményű folyadék-kromatográfia, kapcsolt módszerek. Kapilláris elektroforézis.

Ajánlott irodalom:

1. Pungor Ernő: Analitikai kémia, Tankönyvkiadó (BME egyetemi jegyzet), Budapest, 1985.
2. H.H. Willard, L.L. Merritt, J.A. Dean, F.A. Settle: Instrumental methods of Analysis, Wadsworth Publ. Co., Belmont, California, 1988.
3. R.D. Braun: Introduction to Instrumental Analysis, McGraw-Hill Book Co., New York, 1987.
4. Pokol György - Sztatisz Janisz: Analitikai kémia I., Műszaki Egyetem Kiadó, Budapest, 1999.
5. Burger Kálmán: Az analitikai kémia alapjai, Semmelweis Kiadó, Gyula, 1999.

SZERKEZETVIZSGÁLÓ MÓDSZEREK

Tantárgyfelelős: Kövér Katalin

A tárgy oktatója: Kövér Katalin

Óraszám/hét: 2+0+0 Periódus: 2. félév

Kreditszám: 3

Számonkérés módja: Kollokvium

Javasolt előtanulmány: BSc Spektroszkópiai módszerek

Tematika: (a kurzus célja, rövid tematikája)

A kurzus célja:

A kémiai szerkezetkutatásban alkalmazott korszerű spektroszkópai módszerek elvi és mérés technikai alapjainak olyan szintű ismertetése, amely szükséges és elegendő a gyakorlatban tipikusan felmerülő szerkezeti problémák megoldásához.

Tematika:

A magspin-relaxáció: spin-rács- és a spin-spin relaxációs idők. A Bloch-egyenletek. A Bloch-egyenletek megoldása, a rezonancia-sáv alakja, a telítés. Relaxációs mechanizmusok. Az impulzus NMR alapelve. T_1 és T_2 mérése. A dinamikus NMR alapjai, két- és többhely-cserék, az NMR-időskála. Ekvivalencia és belső rotáció. A dinamikus NMR alkalmazásai. Az NMR kettős-rezonancia módszer és alkalmazásai. Az FT NMR módszer alapjai.

Elektron színeképek effektusainak értelmezése molekulászerkezeti sajátosságok alapján. Fluoreszcencia jelenségének értelmezése és alkalmazása fluoreszcencia spektroszkópiában; emissziós és gerjesztési spektrumok, fluoroforok. Raman spektroszkópia alapelve és összehasonlítása az infravörös spektroszkópiával. Molekulák optikai paramétereinek (optikai forgatás, cirkuláris kettőstörés, cirkuláris dikroizmus) vizsgálata királis nem racém vegyületek jellemzésére.

Ionizációs módszerek a tömegspektrometriában. Fragmentációs folyamatok értelmezése. Ionstabilitás. Ionkémiai alapfogalmak. Ütközési folyamatok elmélete, gyakorlata. Szerkezeti problémák megoldása spektroszkópai módszerekkel az adatok együttes értelmezésével. Fragmentációs szabályok ismertetése és értelmezése. Tömegspektrumok elemzése, interpretálása. Gázkromatográfia-, folyadékkromatográfia-tömegspektrometria kapcsolata, alkalmazási lehetőségek.

Ajánlott irodalom:

1. Szilágyi László: Mágneses rezonancia, Tankönyvkiadó, Budapest, 1987., Kossuth Egyetemi Kiadó, Debrecen, 2001.
2. P.J.Hore: Mágneses magrezonancia, Nemzeti Tankönyvkiadó RT, Budapest, 2003.
3. Dinya Z.: Elektronspektroszkópia, Tankönyvkiadó, Budapest, 1979.
4. Dinya Z.: Infravörös spektroszkópia, Tankönyvkiadó, Budapest, 1981.
5. Dinya Z.: Szerves tömegspektrometria, Debreceni Egyetemi Kiadó, Debrecen, 2002.

MŰSZERES ANALITIKA GYAKORLAT

Tantárgyfelelős: Gáspár Attila

A tárgy oktatója: Fábián István, Farkas Etelka, Gáspár Attila, Kövér Katalin

Óraszám/hét: 0+0+3 Periódus: 3 és/vagy 4. félév

Kreditszám: 2

Számonkérés módja: Gyakorlati jegy

Javasolt előtanulmány:

Tematika: (a kurzus célja, rövid tematikája)

Túlnyomásos rétegekromatográfia. Kapilláris elektroforézis. Ionszelektív elektródok készítése és alkalmazása. Flow Injection Analysis. Speciációk vizsgálata. On line mintabeviteli módszerek. Hidridtechnikák az atomabszorpciós analízisben. ICP-OES analitikai alkalmazásai. Analitikai módszerek validálása.

Ajánlott irodalom:

1. Pungor Ernő: Analitikai kémia, Tankönyvkiadó (BME egyetemi jegyzet), Budapest, 1985.
2. H.H. Willard, L.L. Merritt, J.A. Dean, F.A. Settle: Instrumental methods of Analysis, Wadsworth Publ. Co., Belmont, California, 1988.

3. R.D. Braun: Introduction to Instrumental Analysis, McGraw-Hill Book Co., New York, 1987.
4. Pokol György - Sztatisz Janisz: Analitikai kémia I., Műszaki Egyetem Kiadó, Budapest, 1999.
5. Burger Kálmán: Az analitikai kémia alapjai, Semmelweis Kiadó, Gyula, 1999.

SZERKEZETVIZSGÁLÓ MÓDSZEREK GYAKORLAT

Tantárgyfelelős: Szilágyi László

A tárgy oktatója:

Óraszám/hét: 0+0+3

Periódus: 3. és/vagy 4. félév

Kreditszám: 2

Számonkérés módja: Gyakorlati jegy

Javasolt előtanulmány: Spektroszkópiai módszerek BSc kurzus teljesítése, Szerkezetvizsgáló módszerek

Tematika: (a kurzus célja, rövid tematikája)

A kurzus célja: Tantermi számolási, ill. spektrumelemzési példák segítségével a hallgató gyakorlati ismeretekre tesz szert a különböző korszerű spektroszkópiai módszerek alkalmazására a kémiai szerkezetmeghatározásban.

A kurzus célja: Tantermi számolási, ill. spektrumelemzési példák segítségével a hallgató gyakorlati ismeretekre tesz szert a különböző korszerű spektroszkópiai módszerek alkalmazására a kémiai szerkezet meghatározásban.

Tematika: Számolási gyakorlatok a Zeeman-kölcsönhatás, Boltzmann-eloszlás, kémiai árnyékolás, eltolódási skálák témaköréből. ^1H NMR példák egyszerű gyengén csatolt spin-rendszerekre. Egyszerű spektrumrekonstrukció. Kvázi gyengén csatolt rendszerek. Bonyolultabb ^1H NMR példák. Átfedések, hiányos spektrális információk. Példák a ^{13}C NMR szerkezeti alkalmazásaira. Additivitási eltolódás-szabályok. ^1H és ^{13}C együttes alkalmazása molekulaszerkezet, térszerkezet meghatározására. Az impulzus-FT-NMR alapjai gyakorlati műszerbemutatás alapján.

UV-Vis, CD és IR spektrumok felvétele és értékelése. IR, UV és CD spektrumokon alapuló szerkezet-meghatározó feladatok megoldása. A teljes szerkezet meghatározására irányuló komplex szerkezetvizsgáló feladatok megoldása: NMR, UV, IR, MS, CD adatok kombinációja

Tömegspektrometria: mérési módszerek megismerése (elektron és kémiai ionizáció). Tömegspektrumok felvétele. Gázkromatográfia-tömegspektrometria vizsgálatok. Ismeretlen szerkezetű vegyületek szerkezet meghatározása MS mérések alapján. Az egyes vegyületcsaládok MS jellemzői, gyakorlatokon keresztül bemutatva.

Ajánlott irodalom:

1. Szilágyi László: “ ^1H NMR spektrumok”, Tankönyvkiadó, Budapest, 1979, és folyamatos utánnyomások.
2. R.M. Silverstein, F.X. Webster: „Spectrometric Identification of Organic Compounds”, Wiley 1998.
3. Dinya Z.: Elektronspektroszkópia, Tankönyvkiadó, Budapest, 1979.
4. Dinya Z.: Infravörös spektroszkópia, Tankönyvkiadó, Budapest, 1981.
5. Dinya Z.: Szerves tömegspektrometria, Debreceni Egyetemi Kiadó, Debrecen, 2002.

A VEGYÉSZMÉRNÖKI TUDOMÁNY ALAPJAI

Tantárgyfelelős: Kéki Sándor

A tárgy oktatója: Nagy Miklós

Óraszám/hét: 2+0+0

Kreditszám: 3

Számonkérés módja: kollokvium

Javasolt előtanulmány: BSc Kémiai technológia I-II.

Tematika: (a kurzus célja, rövid tematikája):

A vegyészmérnöki tudomány elméleti alapjainak és a vegyészmérnöki számítások alapjainak ismertetése.

A hasonlósági módszer. A fizikai mennyiségek, mértékegység, dimenzió, dimenzionális homogenitás. A fizikai mennyiségek jellemzése. Skalár – vektor – tenzor. Kovariancia. A jelenségek hasonlósága. Hasonlósági kritériumok és hasonlósági invariánsok. Extenzív és intenzív mennyiségek. Mérlegegyenletek. Áramok. Differenciális mérleg. Egyértelműségi feltételek. A transzportelmélet, az általános transzportegyenlet – a műszaki folyamatok rendszerezésének alapja. Dimenzióanalízis. A dimenzióanalízis tárgya. A dimenzióanalízis módszere. A dimenziómátrix. A dimenzió nélküli számok meghatározása. Kapcsolat a dimenzió nélküli számok különböző csoportjai között. A dimenzióanalízis és a hasonlósági módszer. Aero- és hidrodinamika. Az alapegyenletek: Navier-Stokes törvény, Bernoulli egyenlet. Az impulzustranszport egyenlete. Az impulzusmérleg. Hasonlósági transzformáció. Szabad áramlás. Az egyértelműségi feltételek változásának hatása. Impulzustranszport turbulens áramlásban. Folyadék és szilárd részecskék együttes áramlása. A mérlegegyenletek. Hasonlósági transzformáció. Hővezetés és diffúzió. Alapegyenletek. Hővezetés. Diffúzió. A tömegtranszport kontinuitási egyenlete. Tömegtranszport áramló folyadékokban. Hőcsere áramló folyadékokban. Termodiffúzió. Kémiai reakciók. Az alapegyenletek. Tömegmérleg. Energiamérleg. Impulzusmérleg. Reaktortechnika alapjai. Vegyipari reaktorok termikus vizsgálata. Egyensúlyi összefüggések, fázisegyensúly, egyensúlyi görbe, munkavonal.

Ajánlott irodalom:

1. Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry, 5th ed., Weinheim, Federal Republic of Germany, VCH, Volumes: B1-B8, 1990-1995.
2. J. M. Coulson, J. F. Richardson, R. K. Sinnott: Chemical Engineering 1-6, Pergamon, Oxford (1983)
3. A. L. Lydersen: Fluid Flow and Heat Transfer, John Willey & Sons, (1982)
4. Szűcs Ervin: Hasonlóság és modell, Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1972.
5. Benedek Pál – László Antal: A vegyészmérnöki tudomány alapjai, Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1964.
6. K. G. Denbigh – J. C. R. Turner: Kémiai reaktorok, Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1971.

VÁLOGATOTT FEJEZETEK A KÉMIAI TECHNOLÓGIÁBÓL

Tantárgyfelelős: Nemes Sándor

A tárgy oktatója: Nemes Sándor

Óraszám/hét: 2+0+0

Kreditszám: 3

Számonkérés módja: kollokvium

Javasolt előtanulmány: BSc Kémiai technológia I.-II.

Tematika: (a kurzus célja, rövid tematikája):

A szerves vegyipari alapfolyamatok megismertetése ipari példákkal. Paraffin-szénhidrogének klórozása. Paraffin-szénhidrogének nitrálása. Paraffin-szénhidrogének szulfonálása. Paraffin-szénhidrogének oxidálása. Olefinek klórozása. Olefinek hidratálása. Olefinek oxidálása. Szintézisek CO-H₂-gázelegekkel. Oxosztézis. Aromás vegyületek nitrálása. Aromás aminok nitrovegyületekből. Aromás vegyületek szulfonálása. Aromás vegyületek klórozása. Aromás vegyületek oxidálása. Friedel-Crafts-reakciók. Acilezés. Észteresítések. Fotokémiai vegyipari alapfolyamatok. Redukciók. Szerkezeti anyagok a szerves vegyiparban. A szerves vegyipari alapfolyamatok környezetvédelmi vonatkozásai.

Ajánlott irodalom:

1. Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry, 5th ed., Weinheim, Federal Republic of Germany, VCH, Volumes: A1-A28, 1985-1996.
2. Deák Gyula: Szerves vegyipari alapfolyamatok kézikönyve, Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1978.
3. K. Wiessermel, H.J. Arpe, Ipari Szerves Kémia, NTK, 1993.

3. Szabadon választható szakmai tárgyak

INTÉZMÉNYEN KÍVÜLI GYAKORLAT

Tárgyfelelős: Kuki Ákos

A tárgy oktatója:

Időtartama: 4 + 1 hét

Kreditszám 1 kr

Azon hallgatóknak, akik a BSc képzésük során intézményen kívüli gyakorlaton nem vettek részt kötelező a tárgy teljesítése.

A kurzus célja ismerkedés leendő munkahelyekkel, tapasztalatszerzés leendő munkahelyekről, a megszerzett szakmai ismeretek alkalmazása, záróbeszámoló készítése. A gyakorlat során 4 hét szolgál a tényleges gyakorlati/kísérleti feladatok elvégzésére, míg 1 hét áll rendelkezésre a záróbeszámoló elkészítésére.

MATEMATIKAI MÓDSZEREK A KÉMIÁBAN ÉS A VEGYÉSZMÉRNÖKI TUDOMÁNYBAN

Tárgyfelelős: Póta György

A tárgy oktatója: Póta György

Óraszám/hét: 2+0+0

Kreditszám 3 kr

Előfeltétel: Minimum 12 kredit matematika (BSc-n és MSc-n együtt).

A tárgy szabadonválasztható kurzusként a kémia BSc. képzésben is teljesíthető. A képzés során azonban csak egyszer, ezért újra felvételre, illetve a korábbi képzés elismertetésére nincs lehetőség.

A kurzus célja az alapoató matematikára építve olyan speciális matematikai módszerek és készségek elsajátíttatása, amelyek közvetlenül alkalmazhatók a kémiában, a vegyészmérnöki tudományban illetve az ezeket megalapozó fizikai ismeretkörben. Hasznos

lehet azok számára, akik BSc végzettséggel nagyműszeres vagy mérnöki jellegű munkát szándékoznak vállalni vagy MSc képzésre kívánnak jelentkezni.

Rövid tematika: Fourier- és Laplace-transzformáció, nagyműszeres alkalmazások, speciális differenciálegyenletek megoldása. Közönséges és parciális differenciálegyenletek, analitikus és numerikus megoldás, kvalitatív elmélet, reakciókinetikai, kvantummechanikai, anyag- és energiaátadási alkalmazások.

1. Ja. B. Zeldovics, A. D. Miskisz: Az alkalmazott matematika elemei, Gondolat, Bp. 1978.
2. Műszaki Matematikai gyakorlatok, BME jegyzetsorozat: Vektoranalízis, Közönséges differenciálegyenletek I- II, Parciális differenciálegyenletek.
- A. N. Tyihonov, A. A. Szamarszkij: A matematikai fizika differenciálegyenletei, AK, Bp. 1956
3. Bazsa György (szerk.): Nemlineáris dinamika és egzotikus kinetikai jelenségek kémiai rendszerekben, egyetemi jegyzet, Debrecen-Budapest-Gödöllő, 1992

KOORDINÁCIÓS KÉMIA

Tantárgyfelelős: Tóth Imre

A tárgy oktatója: Farkas Etelka és Tóth Imre

Óraszám/hét: 2+0+0 Periódus: 1. félév

Kreditszám: 3

Számonkérés módja: Kollokvium

Javasolt előtanulmány: Szervetlen kémia II., Fizikai kémia II., Spektroszkópiai módszerek
BSc kurzusok teljesítése

Tematika: (a kurzus célja, rövid tematikája)

Koordinációs kémiai alapfogalmak, komplex vegyületek nevezéktana. Koordinációs izoméria. Kristályelmélet és ligandumtérelmélet. A komplexek optikai és mágneses sajátságai. Az UV-látható spektrofotometria alkalmazása komplex vegyületek jellemzésében. Az ESR és NMR spektrometria koordinációs kémiai vonatkozásai. Egyéb módszerek: IR-, Raman-, Mössbauer spektroszkópia alkalmazása a komplexek szerkezetvizsgálatában. Diffrakciós módszerek oldatokban. A komplex egyensúlyok termodinamikája. Makroszkópikus és mikroszkópikus egyensúlyi folyamatok. A komplexek stabilitását befolyásoló tényezők. Kinetika és mechanizmus: oldószercsere-, komplexképződés- és redoxireakciók.

Ajánlott irodalom:

1. M. T. Beck, I. Nagypál: Chemistry of Complex Equilibria, Akadémiai Kiadó, Budapest, 1990;
2. J. Burgess: Ions in Solution: Basic Principles of Chemical Interactions, Ellis Horwood Series in Inorganic Chemistry, 1988;
3. S. F. A. Kettle: Physical Inorganic Chemistry: A Coordination Chemistry Approach, Spektrum Academic Publishers, 1996;
4. E. A. V. Ebsworth, D. W. H. Rankin, S. Cradock: Structural Methods in Inorganic Chemistry, 2nd ed., Blackwell Scientific Publications, 1991.
5. N. N. Greenwood, A. Earnshaw: *Az elemek kémiája* (Nemzeti Tankönyvkiadó, 2. kiadás, Budapest, 2004)

ALKALMAZOTT KOORDINÁCIÓS KÉMIA

Tantárgyfelelős: Tircsó Gyula

A tárgy oktatója: Tircsó Gyula

Óraszám/hét: 2+0+0 Periódus: 2-4. félév

Kreditszám: 3

Számonkérés módja: Kollokvium

Javasolt előtanulmány: Szervetlen kémia II., Analitikai kémia I. BSc kurzusok teljesítése

Tematika: (a kurzus célja, rövid tematikája)

Komplexbépezők szerepe az ioncserélő kromatográfiás és folyadék-folyadék extrakciós elválasztásokban: ritkafémek kinyerése, radiokémiai elválasztások. A fémkomplexek a mezőgazdaságban: mikroelemtrágyák és növényvédőszerkek. Komplexbépezők az energetikában.

Hőtechnikai berendezések tisztítása, sajátásaik javítása komplexbépezőkkel. A kelátképező igandumok orvosi diagnosztikai és terápiás alkalmazásai. Toxikus nehézfémek élő szervezetből történő eltávolításának gyorsítása, létfontosságú elemek bevitele komplexbépező ligandumokkal. A biológiai hatás és a komplexbépező tulajdonságok kapcsolata, a ligandumok tervezése. Fémkomplexek az izotóp-daignosztikában és tumor-terápiában. Paramágneses fémkomplexek alkalmazása az NMR-tomográfiában kontrasztnövelő anyagként.

Ajánlott irodalom:

1. D.M. Taylor, D.R. Williams: Trace elements in medicine and chelation therapy, The RSC, 1995.
2. R.B. Lauffer, Paramagnetic metal complexes as water proton relaxation agents, Chemical Review, 87, 901-927, 1987.
3. Környei József, A nukleáris medicina fizikai kémiai alapjai, Egyetemi kiadó, Debrecen, 1997.

MAKROCIKLUSOS LIGANDUMOK KOMPLEXEI

Tantárgyfelelős: Tircsó Gyula

A tárgy oktatója: Lázár István, Tircsó Gyula

Óraszám/hét: 2+0+0 Periódus: 2-4. félév

Kreditszám: 3

Számonkérés módja: Kollokvium

Javasolt előtanulmány: Szervetlen kémia II., Szerves kémia II. BSc kurzusok teljesítése

Tematika: (a kurzus célja, rövid tematikája)

A makrociklusos komplexbépezők felfedezése, a ligandumok típusai. A ligandumok szelektivitása és a makrociklusos effektus. A makrociklushoz kapcsolt funkciócsoporthoz szerepe a szelektivitásban és a komplexek stabilitásában. A makrociklusos gyűrűk kialakítására használt szintetikus eljárások. Funkcionalizált makrociklusok előállítása, az alkalmazott származékképezői reakciók. Koronaéterek, kriptandok és funkciócsoporthoz rendelkező makrociklusok komplexbépező sajátásaik, a komplexek szerkezet. A komplexek kinetikai sajátásaik. A makrociklusos komplexbépezők gyakorlati alkalmazásai. Analitikai, szerves kémiai és biológiai alkalmazási lehetőségeik.

Ajánlott irodalom:

1. Lindoy, L.F., Chemistry of macrocyclic ligand complexes, Cambridge University Press, 1989
2. R.B. Lauffer, Paramagnetic metal complexes as water proton relaxation agents, Chemical Review, 87, 901-927, 1987.

VESZÉLYES ÉS KÜLÖNLEGES ANYAGOK

Tantárgyfelelős: Lázár István

A tárgy oktatója: Lázár István

Óraszám/hét: 2+0+0 Periódus: 2-4. félév

Kreditszám: 3

Számonkérés módja: Kollokvium

Javasolt előtanulmány:

Tematika: (a kurzus célja, rövid tematikája)

A kurzus célja, hogy a hallgatókat megismertesse azokkal a különleges vagy veszélyes anyagokkal, azok hatásával, az előállításuk, kezelésük és megsemmisítésük lehetőségeivel, amelyekkel a hétköznapi életben vagy a szakmai munkájuk során találkozhatnak, és amelyekkel kapcsolatos ismeretek az alapkollokviumok során nem, vagy csak érintőlegesen kerülnek feldolgozásra.

Rövid tematika: A kábítószeres általános ismertetése, törvényi szabályozás. A legismertebb kábítószeres szerkezetének, élettani és tudatra gyakorolt hatásainak az ismertetése, veszélyességük bemutatása. Az emberiség történelme során háborús konfliktusok során fegyverként használt toxikus vegyi anyagok (ún. vegyi fegyverek) általános ismertetése, majd hatásterületenkénti csoportosításuk alapján az egyes csoportok és az azokba tartozó konkrét vegyületek élettani hatásának, az ellenük való védekezésnek az ismertetése. A toxikus vegyi anyagok kimutatása, analitikája, és a megsemmisítésükre vonatkozó ismeretek. A robbanóanyagok és a robbanás fogalmának megismertetése, fizikai-kémiai paraméterekkel történő jellemzése. A robbanásra képes anyagok csoportosítása, legfontosabb képviselőik előállítása, tulajdonságaik, gyakorlati felhasználásaik. Pirotechnikai anyagok, eszközök, alkalmazásaik. Robbanóanyagokkal kapcsolatos alapvető mérési eljárások. Biológiai eredetű mérgező anyagok, bakteriális, növényi és állati mérgek ismertetése, szupertoxinok. Állati és humán viselkedést befolyásoló anyagok, kémiai információátvitel, feromonok szerepe és gyakorlati alkalmazási lehetőségei

Ajánlott irodalom:

1. Dr. Lázár István: Különleges és veszélyes anyagok, egyetemi jegyzet, Egyetemi Kiadó, Debrecen, 2001.
2. Vilem Petr, Handbook for Explosives Engineering Students, Colorado, U.S. 2004.
3. Chemical and Biological Warfare, A Referewnce Handbook, Al Mauroni, ABC-CLIO, July 2003.

BIOKOLLOIDIKA

Tantárgyfelelős: Bányai István

A tárgy oktatója: Novák Levente

Óraszám/hét: 2+0+0

Kreditszám: 3

Számonkérés módja: kollokvium

Tematika: (a kurzus célja, rövid tematikája)

A hallgatók kolloidkémiai ismereteinek elmélyítése a biológia kolloidikai jelenségeinek megértésében, alkalmassá téve őket a biológiai problémák kolloidkémiai oldalról történő megközelítésére, a felmerülő problémák, feladatok ilyen összefüggésben történő megoldására.

A kolloidállapot jelentősége a biológiában. Az élet kialakulásának kolloidkémiai problémái. Határfelületek kialakulása. Micellák, monomolekuláris filmek, koacervációs jelenségek, a kettős lipidmembrán kialakulása. Mesterséges membránok és jelentőségük. Határfelületi jelenségek sejt, egyed és magasabb szerveződési szinteken. Adszorpciós jelenségek a biológiai rendszerekben, biotechnológiai, elválasztástechnikai eljárások. Habok, emulziók, szolok előállítása ill. azok megszüntetése különböző biológiai, orvosi, gyógyszerészeti, stb. eljárásokban. Tenzidek mint káros és mint hasznos felületaktív anyagok. Biológiai makromolekulák, csoportosításuk, reológiai jelenségeik és azok alkalmazása. A szol-gél állapot jelentősége a biológiában. Vizek, talajok, levegő kolloidikája. Kolloidika a környezetvédelemben. Adszorpciós jelenségek felhasználása a környezetvédelemben. Kolloidikai alapjelenségek a modern analitikai eljárásokban

Ajánlott irodalom:

1. D. Fennell Evans and Hakan Wennerstrom: The Colloidal Domain: Where Physics, Chemistry, and Biology Meet, 2nd Ed (Wiley 1999)

DINAMIKUS NMR SPEKTROSKÓPIA

Tantárgyfelelős: Bányai István

A tárgy oktatója: Bányai István

Óraszám/hét: 2+0+0

Kreditszám: 3

Számonkérés módja: kollokvium

Tematika: (a kurzus célja, rövid tematikája)

A kurzus célja, hogy a hallgatók, hogy a hallgatók megismerjék az NMR nem szerves kémiai és nem biokémiai vonatkozású alkalmazásait. A kurzus felvételét a mesterképzés utolsó évében az analitikus specializáció hallgatóinak javasoljuk. *Tematika:* Az NMR spektroszkópia alapelveinek rövid áttekintése. Az NMR relaxáció, relaxációs mechanizmusok. A kémiai egyensúly dinamikájának leírása. A relaxáció és reakciódinamika egyesítése: Bloch-McConnell egyenlet. Dinamikus NMR a T_1 a T_2 és a valós időskálán. Reverzibilis diffúzió. Az NMR tomográfia alapjai. A szilárdfázisú NMR alapelvei.

Ajánlott irodalom:

1. Derome, A.E.: Modern NMR Techniques for Chemistry Research (Pergamon Press) 1993
2. J.P. Hornak: Basics of NMR (<http://www.cis.rit.edu/htbooks/nmr/bnmr.htm>)
3. P.J. Hore, J.A. Jones,, S Winteris: NMR: The Toolkit (Oxford University Press) 2002

SUGÁREGÉSZSÉGÜGY ÉS SUGÁRVÉDELEM

Tantárgyfelelős: Nagy Noémi

A tárgy oktatója: Pellet Sándor

Óraszám/hét: 2+0+0

Kreditszám: 3

Számonkérés módja: kollokvium

Tematika: (a kurzus célja, rövid tematikája)

Az előadás ismerteti a radioaktív anyagokkal végzett biztonságos munka feltételeit, a sugárzás és az élő szervezet kapcsolatát. Az előadások a vendégelőadó elfoglaltságától függően tömbösítve kerülnek megtartásra.

A radioaktivitás egységei, dozimetriai egységek, megengedett dózis, a sugárvédelem hatósági előírásai, radioaktív laboratórium kialakításának feltételei, radioaktív anyagok típusai, veszélyességi csoportok, ezek elleni sugárvédelem, a sugárvédelem mérőműszerei. A sugárzás hatása az élő szervezetre, a sugárhatás fázisai, medicinális hatások, mutációk, környezeti terhelések, kritikus szervcsoportok, effektív felezési idő, kémiai sugárvédelem. A leadott anyag számonkérése kollokviumon történik

Ajánlott irodalom:

1. Nagy Lajos György, Nagyné László Krisztina: Radiokémia és izotóptechnika, Műegyetemi Kiadó, Budapest, 1997.
2. W.R. Hendee, Radioactive Isotopes in Biological Research, Wiley Interscience, 1973.
3. NAÜ Biztonsági sorozat: Ionizáló sugárzás elleni védelem, IAEA 1996.

ÉLŐ RENDSZEREK FIZIKAI KÉMIÁJA

Tantárgyfelelős: Gáspár Vilmos

A tárgy oktatója: Gombos Réka

Óraszám/hét: 2+0+0

Kreditszám: 3

Számonkérés módja: írásbeli vagy szóbeli kollokvium

Javasolt előtanulmány: Fizikai kémia II. előadás Kémia BSc

Tematika: (a kurzus célja, rövid tematikája)

A fizikai kémia kurzus során elsajátított egyes ismeretek alkalmazása biológiai példák felhasználásával. Gyógyszerkémikus specializációt választó hallgatóknak ajánlható.

- Termodinamika a biológiában: munka, hő, energia. A sejt „energiaháztartása”. Az ATP mint az élet tüzelőanyaga. A vázizom energia felhasználásának és energia termelésének dinamikája.
- Gázok termodinamikája: A légzés fizikai kémiája. A bűvárokódás fizikai kémiája
- Transzportjelenségek élő rendszerekben. Diffúzió. Ozmózis félígáteresztő hártyán át, dialízis. Membránok fluiditása. Membrántranszport
- Membránok elektrokémiája: elektrokémiai potenciál, Nernst-egyenlet. Donnan-potenciál. A membránpotenciál eredete.
- Egyensúlyi rendszerek: az egyensúlyi állandók jelentése, jelentősége. A termodinamikai aktivitás. Makromolekulák oldhatósága, kisózás. Hidrofóbicitás, hidrofilitás, protein „folding”, micelláris rendszerek. Kismolekulák vagy ionok kötődése makromolekulákhoz: protonálódás, pufferkapacitás, kooperatív kötődés.
- Kémiai kinetika: elsőrendű reakciók: baktériumok osztódása, radioaktív kormeghatározási módszerek.
- Biokémiai katalízis: Michaelis-Menten (steady-state) kinetikai modell és korlátai (visszairányuló reakció, több köztitermék, több szubsztrát)
- Enzimreakciók szabályozása: gátlás és aktiválás, a pH hatása, szubsztrát gátlás
- Fotokémia és fotobiológia. Fotoszintézis. A látás fizikai kémiája. UV sugárzás hatása a DNS molekulára
- Szerkezetvizsgáló módszerek biológiai alkalmazása: proteinek szerkezetmeghatározása tömegspektrometriás, röntgendiffrakciós és NMR spektroszkópiás módszerekkel. Orvosi képalkotó módszerek: CT, MRI, PET, SPECT, kontrasztanyagok alkalmazása és hatásuk fizikai kémiai háttere

Ajánlott irodalom:

1. Bio-fizikai kémia előadások anyaga házijegyzet formában (készülőben)

2. Damjanovich, Mátyus: Orvosi biofizika Medicina Könyvkiadó, 2000
3. Póta: Fizikai kémia gyógyszerészhallgatók számára Kossuth Egyetemi Kiadó, Debreceni Egyetem, 2003
4. Chang: Physical Chemistry with Applications to Biological Systems 1981
5. Marshall: Biophysical Chemistry John Wiley & Sons, Inc. 1978

ELMÉLETI FIZIKAI KÉMIAI FELADATOK

Tantárgyfelelős: Póta György

A tárgy oktatója: Póta György

Óraszám/hét: 0+2+0

Kreditszám: 2

Számonkérés módja: gyakorlati jegy

Javasolt előtanulmány: BSc kötelező fizikai kémia tárgyak, Anyagszerkezet (BSc)

Tematika: (a kurzus célja, rövid tematikája)

A kurzus célja, hogy a kötelező MSc fizikai kémiai tárgyakhoz kapcsolódva – a BSc képzésben megszerzett ismeretekre építve -- felelevenítse a fizikai kémiai ismereteket, segítse a kötelező tárgyak anyagának elsajátítását és mélyebb fizikai kémiai szemléletmód kialakítását.

Tematika: Haladó feladatok a termodinamika, fázisátmenetek, elegyek, kémiai egyensúly, transzportfolyamatok, elektrokémia, reakciókinetika és az anyagszerkezet köréből valamint a kötelező MSc fizikai kémiai tárgyak speciális témaköreiből. Kémiai jelenségek elméleti modelljeinek kialakítása, egyszerűsítése, megoldási technikák, szoftverek.

Ajánlott irodalom:

1. P. W. Atkins: Fizikai kémia I – III, NTK, Bp. 2002.
2. J. Bares, C. Cerny, V. Fried és J. Pick: Fizikai kémiai számítások, TK, Bp. 1966
3. Nagy Károly (szerk.): Elméleti fizikai példatár, NTK, 2002, fizikai kémiai fejezetei

KOMPLEXKATALIZÁLT SZERVES SZINTÉZISEK

Tantárgyfelelős: Joó Ferenc

A tárgy oktatója: Joó Ferenc

Óraszám/hét: 2+0+0

Kreditszám: 3

Számonkérés módja: kollokvium

Javasolt előtanulmány: felvétel a vegyész MSc képzésbe

Tematika: (a kurzus célja, rövid tematikája)

A kurzus célja, hogy bemutassa az átmenetifém komplexek katalitikus alkalmazásait szerves szintézisekben, ismertesse a katalizált reakciók lehetséges mechanizmusát és értelmezze a fémkomplexek katalitikus hatásának molekulaszervezeti alapjait.

Főbb tématerületek. Kis molekulák (H_2 , HCN, $HSiR_3$, CO, CO_2 , O_2) aktiválásának általános kérdései. Oxidatív addíció, redukzív elimináció. A 18-elektron szabály. Gyökös folyamatok szerepe fémkomplexek által katalizált reakciókban. A homogén-katalitikus szerves szintézisek gyakorlati megvalósítása. A katalizátor visszanyerése. Rögzített komplex katalizátorok, kétfázisú reakciók, fázisátviteli katalízissel kombinált komplexkatalitikus szintézisek. Regio-, sztereo- és enantioszelektív katalízis. Olefinek hidrogénezése, hidrocianálása, hidroszililezése. Telomerizációs reakciók. ketonok, nitrovegyületek, iminek hidrogénezése és hidroszililezése. Reduktív aminálás. Dehidrogénezés. Redukciók

hidrogénátvitellel. C-X kötések (X : oxigén, halogén) hidrogenolízise. Hidroformilezés, karbonilezés és dekarbonilezés. Oxidáció. Válogatott komplexkatalitikus szintézisek biológiailag aktív vegyületek, köztük heterociklusos származékok (kinolinok, béta-laktámok, laktonok) előállítására.

Ajánlott irodalom:

1. Faigl F., Kollár L., Kotschy A., Szepes L.: Szerves fémvegyületek kémiája, Nemzeti Tankönyvkiadó, Budapest, 2001.
2. J.P. Collman, L.S. Hegedus, J.R. Norton, R.G. Finke: *Principles and Applications of Organotransition Metal Chemistry*, University Science Books, Mill Valley, CA, 1987
3. B. Cornils, W.A. Herrmann: *Applied Homogeneous Catalysis with Organometallic Compounds*, Wiley-VCH, Weinheim, 1996
4. P.W.N.M. van Leeuwen: *Homogeneous Catalysis. Understanding the Art*, Kluwer, Dordrecht, 2004.

KÖRNYEZETI KÉMIA II.

Tantárgyfelelős: Bányai István

A tárgy oktatója: Bányai István

Óraszám/hét: 2+1+1

Kreditszám: 4

Számonkérés módja: kollokvium

Tematika: (a kurzus célja, rövid tematikája)

A tárgy célja a fizikai kémiai törvényszerűségek felismerése a természeti folyamatokban, a megszerzett ismeretek alkalmazása a természeti környezetben lejátszódó folyamatok leírására. A modellszámítások módszerei, pontossága, a fizikai kémiai adatbázisok helyes használata. Az energiatermelés és ellátás fizikai kémiája (külső és belső égésű motorok, villanymotorok, hidrogén és metanol gazdaság, bioüzemanyagok), termodinamikai modellszámítások. Egyensúlyi, komplexképződési folyamatok a környezeti kémiában, speciáció számítások. A kémiai környezetszennyezések hatásának elemzése és elhárításának lehetőségei. Kémiai kinetika: korrózió és környezetszennyezés, transzportfolyamatok, a szennyezők áramlása a környezetben, fotokinetika. A környezeti szennyezés kommunikációja, az „öszinteség” jelentése és jelentősége, az adatok és értelmezésük közérthető megfogalmazása.

Ajánlott irodalom:

1. Papp Sándor, Rolf Kümmel: Környezeti kémia, Tankönyvkiadó, Budapest, 1992
2. Dózsa László: A környezeti kémia alapjai, Debrecen, 1993
3. P.W. Atkins: Fizikai kémia, Tankönyvkiadó, Budapest, 2002
4. Van Loon D.W., Duffy S.J.: Environmental Chemistry, Oxford Univ. Press, 2005
5. Ian Williams: Environmental Chemistry, Wiley, 2001

RÖNTGENDIFFRAKCIÓS SZERKEZETVIZSGÁLAT

Tantárgyfelelős: Bényei Attila

A tárgy oktatója: Bényei Attila

Óraszám/hét: 2+0+0

Kreditszám: 3

Számonkérés módja: Írásbeli vagy szóbeli kollokvium vagy vizsgadolgozat

Javasolt előtanulmány:

Tematika: (a kurzus célja, rövid tematikája)

Elméleti és gyakorlati, felhasználói ismereteket adni a röntgendiffrakciós szerkezetvizsgálat hasznosítására preparatív és szerkezeti kémiai munkában. A röntgensugárzás, gyakorlati alkalmazások. A diffrakciós módszerek általában. Az egykristály röntgendiffrakció helye a szerkezet-meghatározási módszerek között. Fourier transzformáció és jellemzői. Legkisebb négyzetek módszere. Szimmetria. A halmazok szerkezete, szilárd anyagok, kristályok, egykristályok, kristályrács, elemi cella, Miller indexek, szimmetria szimbólumok, szimmetria osztályok, krisztallográfiai szimmetriajelölés, szisztematikus hiányok, reciproktér. Egykristályok növelése. A röntgendiffrakciós módszerek fejlődése, detektorok típusai, fotográfiai módszerek. Pordiffrakció. Négykörös egykristály diffraktométerek, térbeli detektálás, CCD kamera. A röntgendiffrakciós szerkezetmeghatározás lépései. Elemi cella méreteinek és szimmetriájának meghatározása, adatgyűjtés, adat/paraméter arány, a szerkezet megoldása és finomítása. Abszolút konfiguráció meghatározása. A direkt módszerek alapjai. Alkalmazásuk korlátai, egyéb szerkezet megoldó módszerek, nehéz atom módszer. Modell és valóság. A röntgendiffrakciós eredmények publikálása, elektronikus publikálás, CIF. A röntgendiffrakciós szerkezet-meghatározás eredménye, jellemző kötőszögek és kötéstávolságok. Torzult szerkezetek (disorder), valószínűségi helymeghatározás. Az atomok hőmozgásának hatásai, ORTEP. Statisztikai jellemzők. A szerkezet-meghatározásban használatos számítógépes programok főbb jellemzői, Xtal, WinGX, ShelX, TeXsan, NRC-VAX, Crystall. Krisztallográfiai adatbázisok. A gyógyszerkémikus hallgatók számára különösen fontos lehet, hogy a tárgy keretein belül részletesen foglalkozunk a polimorfizmus jelenségével. Bemutatjuk a fehérjekrisztallográfia legfontosabb kérdéseit.

Ajánlott irodalom:

1. P.W. Atkins: Fizikai kémia II., 21 fejezet, Nemzeti Tankönyvkiadó, 2002.
2. Harmat Veronika: Röntgendiffrakció. (in Kémia, szerk.: Náray-Szabó Gábor, Akadémiai Kiadó, 2006)

BEVEZETÉS A NEMLINEÁRIS KÉMIAI DINAMIKÁBA (TKME0425)

Tantárgyfelelős: Gáspár Vilmos

A tárgy oktatója: Gáspár Vilmos

Óraszám/hét: 2+0+0

Kreditszám: 3

Számonkérés módja: Kollokvium

Javasolt előtanulmány: BSc Fizikai Kémia II, Matematika II.

Tematika: (a kurzus célja, rövid tematikája)

A tantárgy alapvető célja: A nemlineáris dinamikai jelenségek: az oszcilláció, káosz és mintázatképződés alapvető fizikai-kémiai törvényszerűségeinek áttekintése és megismertetése egyszerű kémiai, elektrokémia és biológiai példák segítségével.

Tematika: Nemlineáris dinamika a kémiában: történeti bevezetés. Alkalmazott kísérleti eszközök. Matematikai alapismeretek. Stacionárius pont stabilitásának meghatározása egy- és kétváltozós rendszerekben. Bistabilitás és hiszterézis autokatalitikus rendszerekben. Égések és robbanások. A kémiai oszcilláció kialakulása. Oszcilláló kémiai rendszerek tervezése és osztályozása: bromát oszcillátorok, klorit oszcillátorok, pH oszcillátorok. A Belouszov-Zsabotyinszkij reakció és mechanizmusa. Az Oregonátor modell. Elektrokémiai oszcillátorok. Gerjeszthetőség. A káosz kialakulása és jellemzése kémiai rendszerekben. Káoszszabályozás. Reakció-diffúzió jelenségek: reakciófrontok, kémiai hullámok és mintázatok. Turing szerkezetek kialakulása és jellemzése.

Ajánlott irodalom:

1. Nemlineáris dinamika és egzotikus kinetikai jelenségek kémiai rendszerekben, egyetemi jegyzet, Bazsa György (szerk.), Debrecen, Budapest, Gödöllő (1992).
2. Nemlineáris dinamika: önszerveződés kémiai és biológiai rendszerekben, digitális tananyag, Tóth Ágota (szerk.), Szeged, Budapest, Debrecen (2013).
<http://www2.sci.u-szeged.hu/physchem/nld/ejegyzet/nld.html>

MÁSODLAGOS TERMÉSZETES ANYAGOK I.

Tantárgyfelelős: Juhász László

A tárgy oktatója: Juhász László

Óraszám/hét: 2 + 0 + 0

Kreditszám: 3

Számonkérés módja: kollokvium

Javasolt előtanulmány:

Tematika: (a kurzus célja, rövid tematikája)

A tárgy célja: bevezetés a szekunder metabolitok kémiájába.

A szekunder metabolitok helye az anyagcserefolyamatokban. Az alifás és aromás vegyületek bioszintézise. A bioszintetikus folyamatok legfontosabb kémiai reakciótípusai (csoportátvitel, ciklizáció, átrendeződés, stb.). A másodlagos természetes vegyületek előfordulása, izolálása, szerkezetvizsgálata. Biológiaiilag aktív metabolitok szerepe a gyógyszerhatóanyag fejlesztésben. Válogatott vegyületek izolálása, szintézise, alkalmazása, SAR vizsgálatok: terpének, szteroidok, alkaloidok, antibiotikumok, stb.

Ajánlott irodalom:

1. Tóth László: Gyógynövény és drogismeret, Egyetemi Kiadó, Debrecen
2. Paul M. Dewick: Medicinal Natural Products: A Biosynthetic Approach; Wiley (2009)
3. Raphael Ikan: Selected Topics In The Chemistry Of Natural Products; World Scientific Publishing (2008)
4. K.C. Nicolau; E.J. Sorensen: Classics in Total Synthesis I.; Wiley (1996)
5. K.C. Nicolau; S.A. Snyder: Classics in Total Synthesis II.; Wiley(2003)
6. X.-T. Liang; W.-S. Fang: Medicinal Chemistry Of Bioactive Natural Products; Wiley (2006)

MÁSODLAGOS TERMÉSZETES ANYAGOK II.

Tantárgyfelelős: Juhász László

A tárgy oktatója: Juhász László, Tóthné Illyés Tünde Zita

Óraszám/hét: 0+0+4

Kreditszám: 3

Számonkérés módja: gyakorlati jegy

Javasolt előtanulmány:

Tematika: (a kurzus célja, rövid tematikája)

A tárgy célja: természetes anyagok izolálása és átalakítása. A természetes anyagok hatóanyagtartalmának vizsgálata vékonyréteggromatográfiás módszerrel. Természetes anyagok elválasztása oszlopkromatográfiás módszerrel. Alkaloidok, terpének, flavonoidok izolálása extrakcióval vagy vízgőzdesztillációval. Természetes anyagok szintézise és kémiai átalakítása.

Ajánlott irodalom:

1. Berényi S.; Patonay T., Juhász László: Szerves Kémiai Praktikum II.; Egyetemi Kiadó Debrecen, 2009.
2. R. Ikan, Natural Products - A Laboratory Guide, Academic, San Diego, 1991.
3. Tóth L., Gyógynövény és drogismeret, DE,

GYÓGYSZERHATÓANYAGOK FEJLESZTÉSE

Tantárgyfelelős: Mihók Ildikó

A tárgy oktatója: Hajkó János, Kóródi Ferenc és Tóth Zoltán

Óraszám/hét: 0+0+4 Periódus: I.-II. félév

Kreditszám: 3

Számonkérés módja: gyakorlati jegy

Javasolt előtanulmány: BSc Szerves kémia

A tárgy célja:

A hallgatók megismerjék a generikus gyógyszer-hatóanyagok fejlesztésének gyakorlatát a témafelvetéstől az üzemelésig.

Tematika:

A téma irodalmának feltárására a gyógyszeriparban alkalmazott irodalmi források megismerése, a közlemények, szabadalmak értelmezése és felhasználása a szintetikus fejlesztési tervek készítéséhez. A tervnek megfelelő alternatív utak, alkalmazott módszerek, technikák kiválasztása figyelembe véve a gyógyszeripari elvárásokat.

A szintetikus fejlesztőlaborok felépítésének, berendezéseinek és azok működésének, használatának megismerése az aktuálisan folyó projectekben való alkalmazásuk közben. A gyógyszeripari laboratóriumi fejlesztésben alkalmazott kémiai reakciók kivitelezésére, a reakciók követésére és azok feldolgozására, valamint a termékek tisztítására alkalmazott módszerek elsajátítása, gyakorlása. A kémiai reakciók követésére és az előállított termékek jellemzésére alkalmazott analitikai lehetőségek megismerése. A laboratóriumi fejlesztési eredmények dokumentálási módjának elsajátítása. A laboratóriumi eljárás üzemeléséhez szükséges dokumentációs tevékenység és az üzemeléssel kapcsolatos feladatok megismerése.

Ajánlott irodalom: A gyakorlat a TEVA Gyógyszeripari Kihelyezett Tanszékén kerül lebonyolításra. Az ajánlott irodalom specifikusan kötődik az elvégzendő feladathoz, és az oktatók által speciálisan kerül összeállításra.

ENZIMTECHNOLÓGIA

Tantárgyfelelős: Barna Terézia

A tárgy oktatója: Barna Terézia

Óraszám/hét: 2+0+0

Kreditszám: 3

Számonkérés módja: kollokvium

Javasolt előtanulmány: Biokémia I és II

Tematika:

Fehérjék felépítése és szerkezeti szintjei. Fehérjék stabilitása, dinamikája és folding. Az enzimműködés alapjai: specificitás és katalitikus hatékonyság Enzimek osztályozása.. Enzimkinetika és regularizáció. Enzimek működésének molekuláris mechanizmusa. Enzimek termeltetése és izolálása. Enzim tulajdonságok javítása fehérje mérnökséggel, természetes

evolúció és *in vitro* evolúció. Enzim immobilizáció. Enzimek mint biokatalizátorok: enzimek a szerves szintézisekben. Enzimek ipari használata: élelmiszer – és gyógyszeripari példák.

Ajánlott irodalom:

1. Keleti Tamás, Enzimtechnika, Tankönyvkiadó
2. R.K. Scopes, Protein purification, Springer-Verlag, Berlin, 1994.
3. W. Hartmeier, Immobilized Biocatalysts, Springer-Verlag, Berlin, 1986.

BIOKÉMIA II

Tantárgyfelelős: Gyémánt Gyöngyi

A tárgy oktatója: Gyémánt Gyöngyi

Óraszám/hét: 0+1+3

Kreditszám: 3

Számonkérés módja: gyakorlati jegy

Tematika:

A tárgy célja, hogy a hallgatók megismerjék az enzimek működésének, szabályozásának alapjait, gyakorlatot szerezzenek az enzimekkel való munkában, enzimkinetikai paraméterek meghatározásában.

Enzimek mint biokatalizátorok. Az enzimek kinetikai tulajdonságainak Michaelis-Menten modellje. A K_M és a v_{max} jelentése és meghatározása. Enzimek stabilitása, környezeti tényezők (pH, hőmérséklet, inhibítor, aktivátor) hatása az enzimaktivitásra. Enzimek specifikus gátolhatósága, ezek kinetikai meghatározási módjai. Az enzimműködés szabályozása, allosztérikus és kovalens módosításon alapuló szabályzás.

Kataláz enzim kivonása és aktivitásának vizsgálata. Emlős lipáz enzim kivonása és aktivitásmérése. Az epe emésztésben betöltött szerepének vizsgálata. Humán acetil-kolin észteráz enzim aktivitásmérése és gátlásának vizsgálata. Béta-glükozidáz enzim kinetikai paramétereinek meghatározása. Béta-glükozidáz enzim gátlása, gátlástípus meghatározás. Amiláz enzim keményítőbontó hatásának tanulmányozása.

Ajánlott irodalom:

1. Ádám Veronika. Orvosi biokémia, (Medicina Könyvkiadó, 2002. ISBN 963 242 967 X
2. J. M. Berg, J. L. Tymoczko, L. Stryer: Biochemistry V. edition (W. H. Freeman and Co. 2002. ISBN 0-7167-4684-0)
3. Keleti Tamás: Enzimkinetika,
4. A. Cornish-Bowden: Fundamentals of enzyme kinetics, 3. reprint (Portland Press, 2002, ISBN 1 85578 072 0)
5. Kandra Lili: Biokémiai gyakorlatok. Egyetemi jegyzet. 4. kiadás (Kossuth Egyetemi Kiadó, 2002)

BIOKÉMIA III.

Tantárgyfelelős: Barna Terézia

A tárgy oktatója: Barna Terézia

Óraszám/hét: 2+0+0

Kreditszám: 3

Számonkérés módja: kollokvium

Javasolt előtanulmány: Biokémia I

Tematika:

A tantárgy célja a Biokémia I anyagára építve mélyebb ismereteket adni a humán szervezet működéséről, védekezési és anyagcsere folyamatairól, azok szabályzásáról.

Fehérjék szerkezete, a konformáció és a működés kapcsolata. Oxigéntranszport-fehérjék. Hemoglobinopátiák. A véralvadás fehérjéi. A kémiai védelem fehérjéi, immunglobulinok. Vázfehérjék, kollagének. Glikoproteinek. Sejtfalanyagok. Lipoproteinek. Membránok felépítése. Az enzimműködés szabályozása. A membrán lipidek és szteroid hormonok bioszintézise. Aminosavak anyagcseréje. A metabolizmus integrációja. Vírusok és onkogének. Biológiai folyamatok szabályozásának molekuláris mechanizmusa. Biológiai transzportfolyamatok.

Ajánlott irodalom:

1. Ádám Veronika. Orvosi biokémia, (Medicina Könyvkiadó, 2002. ISBN 963 242 967 X
2. J. M. Berg, J. L. Tymoczko, L. Stryer: Biochemistry V. edition (W. H. Freeman and Co. 2002. ISBN 0-7167-4684-0).
3. Boross I., Sajgó M., A biokémia alapjai, Mezőgazda Kiadó, 2004.

A GYÓGYSZERHATÁS KÉMIAI ALAPJAI

Tantárgyfelelős: Somsák László

A tárgy oktatója: Somsák László

Óraszám/hét: 2+0+0

Kreditszám: 3

Számonkérés módja: kollokvium

A tantárgy oktatásának célja, elsajátítandó (rész)kézszségek és (rész)kompetenciák:

A tantárgy a molekuláris biológus szakemberek és a gyógyszervegyészek közötti kommunikáció közös nyelvének megalapozásához kíván hozzájárulni. A molekuláris kölcsönhatások szerves és fizikai kémiai alapjainak, a farmakodinamikai és farmakokinetikai sajátságok és a kémiai szerkezet összefüggéseinek, a gyógyszertervezés alapjainak és módszereinek bemutatásával kiegészítő, illetve differenciált szakmai ismereteket nyújt a gyógyszerkémia témaköréből. A tantárgy ismeretanyagának elsajátítása hozzájárul ahhoz, hogy a hallgató képessé váljon multidiszciplináris gyógyszerfejlesztő teamek munkájában való aktív és alkotó részvételre.

A tantárgy tematikája:

Szerves vegyületek szerkezeti sajátságai, funkciós csoportjai, részvételük intermolekuláris kölcsönhatásokban. A kémiai átalakulásokat és molekuláris kölcsönhatásokat meghatározó termodinamikai és kinetikai paraméterek. Gyógyszerszerűség (drug-likeness) kritériumai. Fehérjék (gyógyszercélpontok) szerkezetének meghatározása. Receptorok és enzimek kölcsönhatásai kis molekulákkal. Enzimek gátlása és inaktiválása. Nukleinsavak és kis molekulák kölcsönhatásai. Szénhidrát kölcsönhatások, szénhidrát alapú gyógyszerek. Gyógyszertervezés: találatok (hit) és vezérszerkezetek (lead) megtalálása/generálása; kombinatorikus és paralel (szintézis)módszerek; lead optimalizálás (kvalitatív és kvantitatív szerkezet-hatás összefüggések, farmakofor azonosítás, *in silico* módszerek, ADMET sajátságok).

Kötelező és ajánlott irodalom:

1. R. B. Silverman: *The organic chemistry of drug design and drug action*, Academic Press, San Diego, 1992.
2. H. J. Smith, C. Simons (Eds.): *Enzymes and their inhibition – Drug development*. CRC Press, Boca Raton, 2005.
3. G. L. Patrick: *An introduction to medicinal chemistry*, 3rd edition, Oxford University Press, New York, 2005.
4. C.-H. Wong (Ed.): *Carbohydrate-based drug discovery*, Wiley-VCH, Weinheim, 2003.
5. [Keserű Gy. M., Kolossváry I.:](#) *A kémia újabb eredményei (96. kötet) Bevezetés a számítógépes gyógyszertervezésbe*, [Akadémiai Kiadó](#), Budapest, 2006.

PROFESSIONAL COMMUNICATION IN ENGLISH (Szakmai nyelvhasználat angol nyelven)

Tantárgyfelelős: Dr. Nábrádi Zoltánné

A tárgy oktatója: Dr. Semseiné Szekeres Edit

Óraszám/hét: 0+4+0 Periódus: 2-4. félév

Kreditszám: 3

Számonkérés módja: Gyakorlati jegy

Javasolt előtanulmány: Középfokú, C típusú állami (illetve azzal egyenértékű) nyelvvizsga angol nyelvből

Tematika: (a kurzus célja, rövid tematikája)

A tantárgy célja az, hogy kialakítsa és fejlessze azokat az írásbeli és szóbeli angol szaknyelvi kompetenciákat, melyek a szakmai ismeretek mellett képessé teszik a hallgatókat az angol nyelven létrehozott, különböző diszciplínákhoz tartozó és különböző műfajú írott vagy hangzó szövegek értelmezésére és hasonló szövegek előállítására.

A kurzus során az általános készségfejlesztő nyelvoktatás kiegészítéseként kompetencia alapú, nyelvtani központú, szakmai tartalomba ágyazott, feladat-orientált komplex nyelvi felkészítés folyik. A hallgatók megismerik az angol nyelv azon elemeit, grammatikai, hangsúlyozottan mondattani szerkezeteit, melyek a szaknyelvi szövegalkotás alapjait képezik és melyek tudatos felismerésével és alkalmazásával önállóan képesek szakmai szövegek értelmezésére és alkotására.

Az ismeretek gyakorlati alkalmazására a hallgatók szakmai érdeklődési területükhöz kapcsolódóan önálló kiselőadást tartanak és egy rövid szakmai előadás összefoglalóját nyújtják be írásban.

NMR OPERÁTOR KÉPZÉSI GYAKORLAT I.

Tantárgyfelelős: Kövér Katalin

A tárgy oktatója: Kövér Katalin, Batta Gyula

Óraszám/hét: 0+0+2 Periódus: 2-4. félév

Kreditszám: 2

Számonkérés módja: Gyakorlati jegy

Javasolt előtanulmány:.

Tematika: (a kurzus célja, rövid tematikája)

A képzés célja, hogy a résztvevők elsajátítsák az önálló NMR méréshez szükséges alapvető ismereteket Bruker spektrométereken. Mintakészítés, térhomogenizálás, deutérium lock, impulzus kalibrálás, spektrális ablak és egyéb mérési paraméterek meghatározása. ^1H , ^{13}C NMR spektrumok felvétele. Rutin proton mérés, integrálás, rajzolás, homonukleáris szelektív lecsatolás, vízelnyomás, NOE differencia mérés. ^{13}C NMR mérések szélessávú proton lecsatolással, kapuzott lecsatolással, kvantitatív ^{13}C NMR. J-modulált spin-echo ^{13}C kísérlet.

REAKCIÓKINETIKA/KATALÍZIS

Tantárgyfelelős: Joó Ferenc

A tárgy oktatója: Joó Ferenc; Gáspár Vilmos, Gombos Réka

Óraszám/hét: 2+0+2 Periódus: 2-4. félév

Kreditszám:4

Számonkérés módja: Kollokvium és gyakorlati jegy

A kurzus célja a Fizikai kémia c. tantárgy keretében megismert kinetikai alapelvek alkalmazása összetett reagáló rendszerek kinetikájának leírására, vizsgálatára, és az ismeretek gyakorlati alkalmazási lehetőségeinek bemutatása.

Rövid tematika:

Előadás: Kinetika és mechanizmus: a kinetikai eredmények analízise. Oldatreakciók kinetikája. Összetett reakciók kinetikája. Felületi reakciók kinetikája. Láncreakciók elmélete. Polimerizációs gyökreakciók. Termikus robbanás. Oszcillációs kémiai reakciók. Reakciók nyílt, átáramlásos reaktorokban. Fotokémiai reakciók kinetikája. Homogén katalitikus reakciók. Átmenetifém komplexek katalitikus alkalmazása oldatreakciókban. Heterogén katalitikus reakciók. Szilárd fázisú katalizátorok előállítása és jellemzése. Enzimkatalizált reakciók.

Gyakorlat: Enzimkinetika és enzim-inhibíciós kinetika vizsgálata, H-Cube[®] hidrogénező reaktor alkalmazása, az acetone jódozási reakciójának kinetikai vizsgálata, promotor- és inhibitor-hatás tanulmányozása a H₂O₂ katalitikus bomlásában.

Ajánlott irodalom:

1. Michael J. Pilling, Paul W. Seakins: Reakciókinetika, Nemzeti Tankönyvkiadó, 1997
2. Gadi Rothenberg: Catalysis, Wiley, 2008
3. James H. Espenson: Chemical Kinetics and Reaction Mechanisms, 2nd. Ed., McGraw Hill, 1995
4. B.C. Gates: Catalytic Chemistry, Wiley, 1991

LYX ALAPÚ TUDOMÁNYOS/MŰSZAKI SZÖVEGSZERKESZTÉS

Tantárgyfelelős: Póta György

A tárgy oktatója: Póta György

Óraszám/hét: 0+0+2

Kreditszám: 2 kredit

Tantárgyteljesítési követelmény: gyakorlati jegy

A tárgy szabadon választható kurzusként a kémia BSc képzésben is teljesíthető. A képzés során azonban csak egyszer, ezért újra felvételre, illetve a korábbi képzés elismertetésére nincs lehetőség.

Tematika: A LATEX és LYX installálása; A LYX alapjai. A dokumentum típusának, sajátosságainak és szerkezetének megadása. Gépelés, adatbevitel, nyomtatás. Cím, szerző, dátum, összefoglalás, számozott és számozatlan rész, szakasz, alszakasz, bekezdés, albekezdés. Számozott, számozatlan és definíciós lista készítése. Listák egymásba ágyazása. Idézet, versszak. Latex-parancsok a Lyxben, a RedEvil-Text szövegdoboz. Speciális hatások. Egyenletszerkesztés. A beépített egyenletszerkesztő alkalmazása. Hasznos billentyűsorozatok. Táblázat- és kép beillesztése. Úsztatott táblázat és kép. Táblázat- és képaláírások. Képek előkészítése. A GIMP program, konverzió .eps formátumra, a határolódoboz (bounding box) beállítása. Hivatkozások. Irodalomjegyzék és irodalmi hivatkozások beillesztése. Hivatkozás környezetre, egyenletre, ábrára, táblázatra. Szerzői jegyzetek, lábjegyzetek, végjegyzetek. Függelék, tartalomjegyzék, tárgymutató. A Beamer-dokumentumosztály alapjai. Prezentáció vázlata, dia eleje, vége és címe, egyszerű prezentáció készítése, vetítése. Beamer-listák,

szövegdobozok gyakorlása. Fokozatos megjelenítés. Oszlopok. A dia tartalmának oszlopokba rendezése, oszlopok illesztése. Képek beillesztése.

VÍZKÉMIA ÉS VÍZANALITIKA

Tantárgyfelelős: Fábián István

A tárgy oktatója: Papp Lajos

Óraszám/hét: 2+0+0

Kreditszám: 3 kredit

Tantárgyteljesítési követelmény: kollokvium

Tematika: A víz szerepe Földünk biológiai életében. Miért különleges oldószer a víz? Miért vált stratégiai fegyverré a víz az utóbbi évtizedekben? Földünk vízkészlete. Szennyezésének veszélyei, s új módszerek lehetőségei ennek elhárításában. Felszín alatti ivóvízkészletünk védelme. Palackozott vizek fogyasztásának környezeti hátrányai; egyes esetekben ehhez kapcsolódó szélhámosságok=milliárdos vagyongyűjtők a vízből. Hazánk felszíni folyó és állóvizeinek állapota. Csapadékvizek, az egyre rapszodikusabb felhőszakadások és okaik. Környezettudatos ill. gazdag társadalmak (ivóvízkészletük tengerből). Tengervizek és szennyezéseik. Évezredes sivatagok közepén ma pálmaerdők (Negev). Ivóvizek, iparvizek, szennyvizek s ezek tisztítási módszerei. A fenti „használt” (szennyezett vizek) regenerálási lehetőségei, módszerei. Vízanalitikai-mintavételi és minta-előkészítési módszerek, különböző vizekből, dúsítási eljárások különböző analitikai eljárásokhoz. A vízanalitika klasszikus és ma is alkalmazható módszerei. (előzetes validálás után). Elektroanalitikai módszerek a folyamatos és szakaszos vízanalitikánál. Optoelektronikai módszerek helye a vízanalitikában. Zónakapillár elektroforézis alkalmazása vízvizsgálatoknál. Az atomabszorpciós módszer és alkalmazásának lehetőségei. Az új szimultán multieleemes atomabszorpciós AAS rendszer ismertetése. Az emissziós szinképelemzés (ICP-OES) alkalmazása szimultán multieleemes vízanalízisnél. Az induktív csatolású plazma-tömegspektrométerek, mint a jelenleg legnagyobb analitikai teljesítményű (10^{-7} - 10^{-9} mikrogramm/cm³ kimutatási határú), igen gyors és drága módszerek. Milyen esetekben szükséges a vízanalitikában ezek használata. „Ipari szennyvíztisztítás” című (az előadó által készített) 50 perces film megtekintése (gyógyszeripar, vegyipar, fémipar stb. példákkal).

REDOX BIOKÉMIA. REAKTÍV OXIGÉN SZÁRMAZÉKOK (ROS) KÉPZŐDÉSE ÉS SZEREPE BIOLÓGIAI RENDSZEREKBEN

Tantárgyfelelős: Fábián István

A tárgy oktatója: Nagy Péter

Óraszám/hét: 2+0+0

Kreditszám: 3 kredit

Tantárgyteljesítési követelmény: kollokvium

Tematika: Redoxi reakciók: alapfogalmak, egyenletek rendezése, oxidációs szám, példák, diszproporciós és komproporciós reakciók, szabadgyökök és zárt héjú oxidáló szerek. Reaktív Oxigén Származékok (ROS, Oxidálószeres és szabadgyökök) képződése biológiai rendszerekben: Neutrofil fagocitózis, NADPH oxidáz enzimsalád, mitokondrium és az elektron transzport lánc, gyógyszerek és xenobiotikumok metabolizmusa, sugárhatás. A ROS biológiailag fontos reakciói. Reakciók RNS, DNS és fehérjék alkotóelemeivel és biológiailag

fontos kismolekulákkal. 1-elektronos és 2-elektronos reakciók és azok összefonódása. A ROS biológiailag fontos molekulákkal való reakcióinak kinetikája. Módszerek, eredmények hasznosítása: jelátviteli mechanizmusok predikciója, biomarkerek keresése és jellemzése. Biológiailag fontos redoxi reakciók termodinamikája. Redox potenciálok, egyensúly, pK. Cisztein származékok redoxi reakciói: Különböző oxidációs állapotok, azok fizikai-kémiai jellemzése és reaktivitása oxidálószerrel és szabadgyökökkel. A reakciók szerepe biológiai rendszerekben. Átmeneti fémek. Reakciópartner, katalizátor enzim aktív centrum, Fenton reakciók. Fehérjék redoxi reakciói. Antioxidánsok. Redoxi reakciók biomarkerei az élő szervezetben. Tömegspektrometria a biológiában és az orvostudományban I. Története, alapelvek, módszerek, műszerek, azok érzékenysége és alkalmazása. Tömegspektrometria a biológiában és az orvostudományban II. Praktikai megfontolások, biomarkerek, proteomika.

MOLEKULAMODELLEZÉS ÉS MOLEKULÁRIS SZIMULÁCIÓK

Tantárgyfelelős: Komáromi István

A tárgy oktatója: Komáromi István

Óraszám/hét: 1+2+0

Kreditszám: 3 kredit

Tantárgyteljesítési követelmény: gyakorlati jegy

A tárgy előfeltétele: teljesített matematika és fizika vagy biofizika kurzusok

A kurzus célkitűzései: Olyan ismeretek nyújtása, melyek segítségével a hallgatók későbbi kutatómunkájuk során képesek lesznek egyszerűbb modellezési feladatok kivitelezésére, egyszerűbb szimulációk végrehajtására.

A kurzus tematikája:

- Bevezetés: matematikai, fizikai és kvantumkémiai alapok
- Molekulagrafika: ((bio)molekulák megjelenítési módjai)
- Molekulamechanika, potenciálfüggvények, empirikus erőterek
- Molekuladinamika alapjai
- A molekuladinamikai szimulációk kiértékelése
- A szabadenergia/szabadentalpia számítása szimulációkból
- Ritka molekuláris szimulációs események és azok számítása
- Konformációs átmenetek számolása
- Membrán protein szimulációk
- hibrid kvantumkémiai/molekulamechanikai szimulációk
- kémiai és biokémiai reakciók modellezése
- Protein szerkezet előrejelzése aminosav sorrendből
- Protein „misfolding” betegségekben
- Molekuláris dokkolás
- Mire alkalmazható (és mire nem) a molekulamodellezés és a molekuláris szimuláció?

Ajánlott irodalom:

1. **Kukol A**, Molecular Modeling of Proteins, **Springer, 2008**
2. **Leach A**, Molecular Modelling: Principles and Applications (2nd Edition), **Prentice Hall, 2001**

A számonkérés módja: projektmunka beadása

4. Analitikus vegyész specializáció

KEMOMETRIA

Tantárgyfelelős: Fábián István

A tárgy oktatója:

Óraszám/hét: 2+0+0 Periódus 2. félév

Kreditszám: 3

Számonkérés módja: kollokvium

Javasolt előtanulmány: Matematika (B.Sc.), Analitikai kémia

Tematika: (A kurzus célja, rövid tematikája)

A kurzus célja a kísérleti eredmények kiértékeléséhez és értelmezéséhez, kísérlettervezési feladatokhoz, hipotézis vizsgálatokhoz szükséges statisztikai és kemometria ismeretek megszerzése.

A szükséges valószínűségelméleti és matematikai statisztikai alapismeretek összefoglalása. Alapfogalmak, legfontosabb diszkrét eloszlások. A legfontosabb folytonos eloszlás: normális eloszlás. Eloszlások közelítése. A statisztikai következtetés. A minta statisztikai jellemzői. A normális eloszlású minta szórásnégyzetének eloszlása. F-eloszlás és t-eloszlás (Student-eloszlás). Hipotézisvizsgálat, statisztikai próbák. Első- és másodfajú hibák. U-próba, χ^2 -próba a variancia vizsgálatára. Két szórásnégyzet összehasonlítása (F-próba). Több szórásnégyzet összehasonlítása (Bartlett- és Cochran-teszt). t-próbák a várhatóérték vizsgálatára: egymintás t-próba, kétmintás t-próba, páros t-próba. Paraméterbecslések. A becslések tulajdonságai. Legkisebb négyzetek módszere, maximum-likelihood (legnagyobb valószínűség) módszere, momentumok módszere. Illeszkedés vizsgálatok statisztikai próbával és grafikus módszerekkel. Több valószínűségi változó együttes eloszlása, korreláció. Egyváltozós lineáris regresszió. Regresszió analízis ismétlés nélküli és ismételt mérések esetén. Jövlási sáv meghatározása. Az illesztett egyenes meredekségének és tengelymetszetének vizsgálata. Két regressziós egyenes összehasonlítása. Többváltozós lineáris regresszió. Ismétlés nélküli mérés, σ_y^2 konstans. Az egyes változók szignifikanciájának vizsgálata. Nemlineáris regresszió. Regresszió polinomokkal. Regresszió, ha a független változó is valószínűségi változó. Hibaterjedési törvény és alkalmazása. A tapasztalati regressziós függvény típusának kiválasztása. Regressziós problémák megoldásának előkészítése és a feltételezések utólagos ellenőrzése. Reziduumok vizsgálata.

Bevezetés a kísérlettervezésbe, mennyiségi és minőségi változók, mérési skálák. Többfaktoros kísérletek. Adatok transzformációja. Varianciaanalízis (ANOVA): egy faktor szerinti osztályozás I. A modell. A modell paramétereinek becslése. Az eltérés-négyzetösszeg felbontása. Hipotézis vizsgálat és ANOVA tábla. Varianciaanalízis (ANOVA): egy faktor szerinti osztályozás II. Konfidencia intervallum az egyes csoportok várható értékére. A varianciák homogenitásának vizsgálata. A másodfajú hiba valószínűsége, a kimutatható eltérés nagysága. Összehasonlítások egy faktor két vagy több szintjére. Két szint összehasonlítása. Az összehasonlítás általánosítása: kontrasztok. Többszörös összehasonlítások. Tervezett és post hoc összehasonlítás. Variancia analízis véletlen faktor esetén. Keresztosztályozás két véletlen faktor esetén. Másodfajú hiba valószínűsége és a kimutatható eltérés nagysága véletlen faktorok esetén. Hierarchikus osztályozás (Nested design). A variancia analízis nemparaméteres alternatívái. Kovariancia analízis. Klasszikus kovariancia analízis egy kísérő változóra. Kovariancia analízis ortogonális kísérő változóval.

Regresszióanalízis és a varianciaanalízis kombinációja. A hipotézisek vizsgálata az általános regressziós próbával. Az egyenesek párhuzamosságának vizsgálata. Az egyenesek vízszinteségének vizsgálata. Hipotézisek vizsgálata ortogonális modellel. Bevezetés a sokváltozós statisztikába. Miért és mikor használunk sokváltozós statisztikai módszereket?

Megfelelő módszerek kiválasztása. Az egy és kétváltozós statisztikai módszerek általánosítása. A sokváltozós normális elosztás paraméterei, és a paraméterek becslése.

Főkomponens analízis. Korrelációs és kovariancia mátrixok. Geometriai megközelítésű modell alkalmazása. Főkomponens értékek és főkomponens súlyok, kommunalitás számítása. Többváltozós tér dimenzióinak csökkentése. Korreláció a változók és a főkomponensek között.

Faktoranalízis. A faktoranalízis és a főkomponens analízis összehasonlítása. Mikor melyik módszert alkalmazzuk? Varimax rotáció. A faktor és főkomponens analízissel kapott eredmények interpretációja. Diszkriminancia analízis. Alapelvek és alkalmazások. Két és több csoport összehasonlítása diszkriminancia analízissel. Lineáris diszkriminancia analízis kemometriai alkalmazásai. Clusteranalízis. Hasonlóság mérése, korrelációt, távolságot és asszociáltságot mérő koeficienssek. Csoportképző algoritmusok. Hierarchikus és nemhierarchikus clusteranalízis. Dendrogram és interpretációja. Alakfelismerő módszerek áttekintése.

Ajánlott irodalom:

1. Kemény S., Deák A. 2000. Kísérletek tervezése és értékelése. Műszaki Kiadó, Budapest
2. Kemény S., Deák A. 1997. Bevezetés a Statistica 5.0 for Windows program használatába. Műegyetemi Kiadó, Budapest.
3. Horvai Gy. (szerk.) 2001. Sokváltozós adatelemzés (kemometria). Nemzeti Tankönyvkiadó, Budapest.

ANALITIKAI MINŐSÉGBIZTOSÍTÁS

Tantárgyfelelős: Fábián István

A tárgy oktatója:

Óraszám/hét: 1+0+0 Periódus 4. félév

Kreditszám: 1

Számonkérés módja: kollokvium

Javasolt előtanulmány: analitikai kémia (B.Sc.)

Tematika: (A kurzus célja, rövid tematikája)

Az igényeknek való megfelelés – minőségbiztosítási rendszerek kialakulása. Akkreditáció (ISO/IEC 17025) és minőség menedzsment (ISO 9000:2000). Helyes laboratóriumi gyakorlat GLP (Good Laboratory Practice). Total Quality Management (TQM) alapelveinek ismertetése

Minőségirányítási kézikönyvek. Statisztikai alapok. Mérési bizonytalanság. Kalibráció, kimutatási és meghatározási határok. Metrológia a kémiában, analitikai eredmények nyomkövetketősége. Tanúsított anyagminták (Certified Reference Materials) Analitikai módszerek validálása. Ellenőrző kártyák használata laboratóriumokban Laboratóriumi körmérések.

Ajánlott irodalom:

1. Kemény S., Papp L., Deák A. 1998. Statisztikai minőség- (megfelelőség)-szabályozás. Műszaki Könyvkiadó – Magyar Minőség Társaság, Budapest.
2. B.W. Wenclawiak (ed). 2002. Quality Assurance in Analytical Chemistry:
3. Training and Teaching Springer Verlag
4. Palotai K., Győri P. , 1998. A TQM elmélete és gyakorlata. IMSYS Vezetési Tanácsadó Kft. Budapest

ELEKTROFORETIKUS MÓDSZEREK

Tantárgyfelelős: Dr. Gáspár Attila
A tárgy oktatója: Dr. Gáspár Attila
Óraszám/hét: 2+0+0
Kreditszám: 3
Számonkérés módja: kollokvium
Előfeltétel:

Tematika:

Elektroforézis elmélete, klasszikus elektroforetikus technikák (agaróz gél elektroforézis, SDS-PAGE, izoelektromos fókuszálás). Blottolási technikák. Elektroforetikus módszerek a DNS szekvenálásnál. Kapilláris elektroforézis és legfontosabb technikái (kapilláris zónaelektroforézis (CZE), micelláris elektrokinetikus kapilláris kromatográfia (MEKC), kapilláris gélelektroforézis (CGE), kapilláris izoelektromos fókuszálás (CIEF), kapilláris izotachoforézisről (CTIP) kapilláris gélelektroforézis (CGE), affinitás kapilláris elektroforézis (ACE), elektrokromatográfia (EC)). Az elektroforetikus módszerek kifejlesztésének lépései. Az elektroforézis legújabb fejlődési irányai (mikrofluidikai analitikai eszközök, chip elektroforézis, lab-on-a-chip technológia).

Az elektroforetikus készülékek általános felépítése és működtetése. Minőségi és mennyiségi analízis módszerei. Gyógyszerészeti, klinikai, biotechnológiai, molekuláris biológiai alkalmazások. Speciális alkalmazási területek (királis elválasztások, single cell analysis, molekulák köcsönhatásainak vizsgálata). Kapcsolt technikák. Az elektroferogramok kiértékelése.

Ajánlott irodalom:

1. R. Westermeier: Electrophoresis in Practice, VCH, 1993
2. D.N.Heiger: High Performance Capillary Electrophoresis, Hewlett-Packard, Waldbronn, 1992 (ISBN 12-5091-6199E)
3. Anurag S. Rathore, András Guttman: Electrokinetic Phenomena, Marcel Dekker, 2004 (ISBN: 0-8247-4306-7)
4. Gáspár A.: Kapilláris zónaelektroforézis, Egyetemi Kiadó, Debrecen, 2000.
5. az előadás ábraanyaga

A KÖRNYEZETANALITIKA SZERVETLEN KÉMIAI MÓDSZEREI

Tantárgyfelelős: Braun Mihály
A tárgy oktatója: Braun Mihály
Óraszám/hét: 1+0+4 Periódus: 2. félév
Kreditszám: 4
Számonkérés módja: Gyakorlati jegy
Javasolt előtanulmány: Szervetlen kémia (BSc)

Tematika: (a kurzus célja, rövid tematikája)

Előadás: Az előadás keretében részletesen foglalkozunk a környezetanalitikai célú mintavétellel, minták előkészítésével és analízisével. Esettanulmányok feldolgozásával és elemzésével mutatjuk be a környezetanalitikai vizsgálatok tervezésének fontosabb szakaszait. Részletesen ismertetjük a speciális műszeres analitikai módszereket. Tárgyaljuk a felszíni és ivóvizek, talajok és levegő fontosabb szervetlen komponenseinek és szennyezőinek meghatározásához használt szabványokat. Részletesen foglalkozunk a terepi mérésekhez használatos technikákkal. Az előadásokon a gyakorlatok végrehajtásához szükséges ismeretek

is elhangzanak. Az előadáshoz kapcsolódó gyakorlathoz szükséges elméleti anyagot a félév első részében, összevontan tárgyaljuk.

Gyakorlat: A gyakorlatokon megismertetjük a leggyakrabban előforduló környezeti mintatípusok (talaj, felszíni és ivóvíz, levegő) szervesen komponenseinek vizsgálati módszereit. Röviden érintjük a mérési módszerek validálását, az eredmények közlését és értékelését. A gyakorlatok kivitelezése 4-5 fős csoportokban történik. Minden gyakorlatnál olyan természetes eredetű ismeretleneket kell meghatározni, melyeknek az összetételét előre meghatároztuk, így az értékelésnél a felkészültségen kívül figyelembe vesszük a gyakorlaton mért eredmény eltérését a várt értéktől. A gyakorlatok mérési eredményeit a félév végén összesítjük, és megtárgyaljuk a leggyakoribb hibákat.

Ajánlott irodalom:

1. Papp L.: Környezeti minták analitikai kémiai vizsgálata, Debreceni Egyetemi Kiadó
2. Papp S., Kümmel, R.: Környezeti kémia, Tankönyvkiadó, Budapest, 1992
3. Pokol Gy., Sztatisz J.: Analitikai Kémia I., Műegyetemi Kiadó, Budapest, 2003

MODERN TÖMEGSPEKTROMETRIA

Tantárgyfelelős: Kéki Sándor

A tárgy oktatója: Kéki Sándor, Nagy Lajos, Kuki Ákos

Óraszám/hét: 2+1+1

Periódus: 4. félév

Kreditszám: 4

Számonkérés módja: kollokvium

Javasolt előtanulmány: Szerkezetvizsgáló módszerek

Tematika: (a kurzus célja, rövid tematikája)

Az előadás célja a hallgatók megismertetése a modern ionizációs módszerekkel, ezek fizikai és kémiai alapjaival, valamint alkalmazási lehetőségeinek bemutatása különböző típusú vegyületek (kis molekulatömegű anyagok, peptidek, szénhidrátok, szintetikus polimerek) molekulatömegének és szerkezetének meghatározására.

Ionforrások, tömeganalizátorok, detektorok. MALDI-TOF MS módszer alapjai és alkalmazásai: polimerek (szintetikus és természetes) móltömegének, móltömegeloszlásának, funkcionalitásának meghatározása. Elektroporlasztásos módszerek (ESI, APCI, APPI). Online (LC, GPC)-ESI MS. MALDI MS/MS és ESI-MS/MS (PSD, CID) módszerek és alkalmazásuk peptidek, oligoszacharidok és kis molekulatömegű vegyületek szerkezetének meghatározására. Egyéb ionizációs módszerek: a DART-technológia, DESI, DAPCI, DAPPI.

Ajánlott irodalom:

1. Dinya Zoltán: Szerves tömegspektrometria, Kossuth Egyetemi Könyvkiadó, 2001
2. Richard B. Cole: Electrospray Ionization Mass Spectrometry: Fundamentals, Instrumentation, and Applications, Wiley, 1997
3. H. Pasch, W. Schrepp: MALDI-TOF Mass Spectrometry of Synthetic Polymers, Springer Laboratory, 2003
4. Q. M. A. Niessen: Liquid Chromatography-Mass Spectrometry, Marcel Dekker, Inc, 1999

MINTAVÉTEL, MINTAELŐKÉSZÍTÉS, ANALITIKAI TESZTEK

Tantárgyfelelős: Posta József

A tárgy oktatója: Fehérné Baranyai Edina

Óraszám/hét: 1+0+4 Periódus 3. félév
Kreditszám: 4
Számonkérés módja: gyakorlati jegy
Javasolt előtanulmány: Műszeres analitika (M.Sc.)

A kurzus célja: Az analitikának a tényleges klasszikus és műszeres elemzést megelőző lépéseinek elméleti és gyakorlati elsajátítása. Gyors analitikai módszerek: teszt, színteszt eljárások elvének és gyakorlatának megismerése.

A tantárgy rövid leírása: Gázok, aeroszolkok, szálló és ülepedő porok mintavétele levegőből. Frakcionált mintavétel kaszkád impaktorokkal. Mintavételi eljárások természetes vizekből. Átlag- és pont-mintavételi módszerek folyadékokból. Szilárd halmazok reprezentatív mintavételi technikái. Talajok, folyami, tavi és tengeri üledékek mintavétele. Módszerek az üledékek réteges szerkezetének megőrzésére. Mintavételi eljárások biológiai és humánbiológiai valamint növényi mintákból. Mintavétel speciációs analitikai célra. Ködök, füstök, talajok szemcseméret szerinti frakcionált mintavétele. A minták stabilizálása. A vett minták szállításának és tárolásának főbb szempontjai. A minták előkészítése klasszikus és műszeres analízishez. Gázok abszorpciója, dúsítása. Folyadékok szűrése. Szilárd minták savas oldása, roncsolása és lúgos feltárása. Száraz hamvasztás, nedves roncsolás atmoszférikus, nagynyomású, zárt térben, hővel és mikrohullámmal elősegítve. Az egyes mintaelőkészítési eljárások előnyei és hátrányai. Nyomelemek dúsítási eljárásai. A vizsgált komponensek elválasztása a zavaró matrixoktól. Teszteljárások, gyorsesztek kémiai alapelvei. Teszteljárások alkalmazása terepi és laboratóriumi analitikai vizsgálatok során. Gyárilag forgalmazott tesztcsíkok, gyorseszt eszközök alkalmazásának elsajátítása, teljesítőképességének mérlegelése.

Ajánlott irodalom:

1. Pap Lajos: Környezeti minták analitikai vizsgálata, Egyetemi jegyzet, DE Kossuth Egyetemi Kiadó, Debrecen, 2004.
2. Erdey László, Mázor László: Analitikai kézikönyv, Műszaki Kiadó, Budapest, 1974.
3. Litheráty Péter: Környezetvédelem analitikája, BME Mérnöktovábbképző Intézet kiadványa, 1975.
4. Radojevič, M., Bashkin V. N.: Practical environmental analysis, The Royal Society of Chemistry, Cambridge, 1999.

KOMPLEXKÉMIAI VIZSGÁLÓMÓDSZEREK

Tantárgyfelelős: Farkas Etelka

A tárgy oktatója: Farkas Etelka, Fábián István, Tóth Imre

Óraszám/hét: 0+0+4 Periódus: 2-4. félév

Kreditszám: 3

Számonkérés módja: Gyakorlati jegy

Javasolt előtanulmány: Szervetlen kémia II, Fizikai kémia II és Analitikai kémia I BSc kurzusok teljesítése

Tematika: (a kurzus célja, rövid tematikája)

1. Egyensúlyi állandók pH-metriás meghatározása: E gyakorlat során néhány egyszerű, vizes rendszerben képződő komplex összetételének és stabilitási állandójának meghatározásán keresztül a gyakorlatot végző megismerkedik az egyensúlyi kémia néhány alapvető fogalmával, továbbá a pH-metriás módszer e területen való alkalmazási lehetőségeivel, illetve az adatok kiértékelése révén a már kész programok alkalmazásával. 2. Fémkomplexek CD-vizsgálata: Betekintés a CD alkalmazási lehetőségeibe Cu(II)-komplexek vizsgálatán

keresztül. 3. Átmenetifém komplexek abszorpciós spektrumának jellemzői. Feladat: Egyensúlyi állandó meghatározás spektrofotometriás módszerrel. 4. Az egyensúly dinamikájának NMR relaxációs vizsgálata Cu(II)-komplexek esetében: Paramágneses NMR-relaxációs módszer segítségével lehetőség nyílik a paramágneses jelenség néhány koordinációs kémiai alkalmazásának megismerésére. 5. Az egyensúly dinamikájának vizsgálata NMR-jelalak analízisével. A vonalszélesedés módszer alkalmazása lassú és gyors csere esetére, a teljes vonalak analízis módszer alapjai.

Ajánlott irodalom:

1. I. Nagypál and M. T. Beck, Chemistry of Complex Equilibria, Akadémiai Kiadó, Budapest, 1990.
2. Burger K., Modern koordinációs kémiai vizsgálómódszerek, Akadémiai kiadó.
3. K. Nakamoto, P.J. McCarthy, Spectroscopy and structure of Metal Chelate Compounds, John Wiley and Sons, 1968.

ÉLELMISZERANALITIKA

Tantárgyfelelős: Csapó János

A tárgy oktatója: Csapó János

Óraszám/hét: 2+0+0 Periódus: 2-4 félév

Kreditszám: 3

Számonkérés módja: kollokvium

Javasolt előtanulmány: Műszeres analitika (M.Sc.)

A tantárgy célja:

A minőségvizsgálat hazai és nemzetközi módszereinek, előírásainak, valamint rendszerének megismertetése. Az üzemi és hatósági minőség-ellenőrzés ismereteinek elsajátítása. Jártasság a gabona, a cukorrépa, olajnövények, kertészeti termékek, tej- és hústermékek minősítésében, továbbá a modern nagyműszeres minőségvizsgálat tanulmányozása. A mérési eredmények értelmezése és felhasználhatósága.

A tantárgy tartalmának rövid leírása:

A minőség fogalma. A minőség-ellenőrzés feladatai és szervezete. A fogyasztók egészségvédelme, fogyasztói elvárások (élvezeti érték, felhasználási jellemzők, biztonság, táplálkozási tulajdonságok). Az élelmiszerekre vonatkozó szabályozás és ellenőrzés, határértékek. A Magyar Élelmiszerkönyv. A FAO-WHO Codex Alimentarius. A magyar szabványok. Minőségvizsgálati módszerek és eszközök. Az AOAC és az AACC módszerek (USA minőségi előírásai és módszerei). Laboratóriumok és termelő egységek akkreditációja

Az őszi búza minősítése a hazai szabvány szerint (tisztaság, szárazanyag tartalom, sikértartalom és minőség, farinográfus érték, SDS-teszt, esésszám mérése). Alveográfus mérés. Próbacipó sütés. Keményítő és cukortartalom mérés polariméterrel. Olajtartalom meghatározás SOXTEC-kel. Rosttartalom meghatározás FIBERTEC-kel. NIR/NIT mérőműszer alkalmazása. Fehérje tartalom meghatározás Kjeldahl és Dumas elven. Aminosav-tartalom meghatározása. Táplálékérték számolása. Ásványi anyag meghatározás (ICP, AAS, egyéb módszerek), HPLC alkalmazása, GMO kimutatás. Radioaktív szennyezettség meghatározása. Mikrobiológiai minősítés

Ajánlott irodalom:

1. Kent K. Stewart-John R. Whitaker: Modern Methods of Food Analysis. AVI Publishing Company, INC Westport, Connecticut, 1984.
2. R. Matissek-F.M. Schnepepl: Lebensmittel – Analytik. Springer Verlag, Berlin, 1992.
3. Hegedűs M. – Kralovánszky U.P. – Mátrai T.: A takarmányfehérjék minősítése. Mezőgazdasági Kiadó, Budapest, 1981.

4. Győri Z. – Győriné Mile I.: A búza minősége és minősítése. Mezőgazdasági Szaktudás Kiadó, Budapest, 1998.
5. Lásztity R. – Törley D.: Alkalmazott élelmiszeranalitika I-II. Mezőgazdasági kiadó, 1987.
6. Karácsony L.: Gabona-, liszt-, sütő- és tésztaipari vizsgálati módszerek. Mezőgazdasági Kiadó, Budapest 1970.

NANOTECHNOLÓGIA

Tantárgyfelelős: Beke Dezső

A tárgy oktatója: Beke Dezső

Óraszám/hét: 2+0+0 Periódus: 2-4 félév

Kreditszám: 3

Számonkérés módja: kollokvium

Javasolt előtanulmány:

A tantárgy célja: Bemutatni a nanofizikai, nanotechnikai és nanotechnológia fogalmak jelentését és tartalmát. Ismertetni a legfontosabb nanotechnológiák alapelveit, azokat a nanoskálájú folyamatokat, amelyekre a jelenlegi vagy elkövetkező technológiák épülnek.

Tematika: Vékony és multirétegek előállítása és minősítése. Felületek nanoskálájú megmunkálása, módosítása és minősítése. Nanosturktúrák mechanikai stabilitása, élettartama. Spin-manipuláción alapuló eszközök tervezése és előállítása. Nanorészecske sokaságok technológiái. Nanomágnesség. Nanodiffúzió. Nanoszegregáció.

Ajánlott irodalom:

1. Giber János és munkatársai: "Szilárdtestek felületfizikája" Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1987.
2. A MATÁV és az MTA közös szervezésében 2004-ben tartott Nanotechnológia szimpózium anyaga (CD)
3. Az előadás alapján írt (de már az első évesek számára is) interneten elérhető jegyzet.
4. Nanomágnesség Belső jegyzet, DE Szilárdtest Fizika Tanszék, 2003.

RADIOANALITIKA (A tárgy megegyezik a radiokémiai specializáció TKME0614 tárgyával, a részletes leírást ld. ott)

Felelős: Nagy Noémi

A tárgy oktatója: Nagy Noémi

Óraszám/hét: 2+0+3, Periódus: 2-4 félév

Kreditszám: 5

Számonkérés módja: kollokvium, gyakorlati jegy

Javasolt előtanulmány: Magkémia (B.Sc.), Analitikai kémia I. (B.Sc.)

Tematika: (ld. TKME0614)

ATOMABSZORPCIÓ

Tantárgyfelelős: Posta József

A tárgy oktatója: Posta József

Óraszám/hét: 2+0+0 Periódus: 2-4. félév

Kreditszám: 3

Számonkérés módja: Kollokvium
Javasolt előtanulmány:

Tematika: (a kurzus célja, rövid tematikája)

Az AAS módszer helye a műszeres analitikán belül. A fényabszorpció és az atomszerkezet kapcsolatának elméleti kérdései. A lángkémia alapjai. A lángba jutó minta átalakulásának, atomizációjának térbeli és időbeli lefolyása, e folyamatok szabályozása. Különböző fizikai-kémiai folyamatai. Mintabeviteli módszerek, zavaró hatások az AA spektrometriában. Az AAS készülék részei. Az egyes egységek szerepe a jel-zaj viszony javításában. A háttérkorrekció elmélete és gyakorlata. Az AAS gyakorlati alkalmazása. Az egyes elemek, elemcsoportok meghatározási lehetőségei, körülményei különböző típusú mintákban. Mintaigény, zajszint, pontosság, megbízhatóság, kimutatási határ, analitikai érzékenység. Az elemzés optimalizálásának gyakorlati kérdései. A mintaelőkészítés módjának befolyása adott elem meghatározására.

Ajánlott irodalom:

1. Pungor E.: A lángfotometria elméleti alapjai, Akadémiai Kiadó, Budapest, 1962
2. W.F. Price: Atomabszorpciós spektrometria, Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1977
3. Pokol Gy., Statisz J.: Analitikai Kémia I., Műegyetemi Kiadó, 1999
4. B. Welz, M. Sperling: Atomic Absorption Spectrometry, Wiley-VCH, New York, 1999

MODERN GÁZ- ÉS FOLYADÉKKROMATOGRÁFIÁS ELJÁRÁSOK

Tantárgyfelelős: Deák György, Kiss Attila

A tárgy oktatója: Kiss Attila, Deák György, Krusper László

Óraszám/hét: 2+0+0 Periódus: 2. félév

Kreditszám: 3

Számonkérés módja: kollokvium

Javasolt előtanulmány:

Tematika:(a kurzus célja, rövid tematikája):

Gázkromatográfia: Gázkromatográfok felépítése, működése (mintaadagolási lehetőségek, detektortípusok). Kolonnatípusok, kolonnatechnológia. Gázkromatográfias módszerek fejlesztése, alkalmazása. Kolonnatípus kiválasztás, a különböző gyártók által forgalmazott kolonnák felcserélhetősége. Kromatográfias paraméterek meghatározása, számolása. Gázkromatográfok üzemeltetése. Adatgyűjtés, adatfeldolgozás. A legelterjedtebb integrátorok és adatrendszerek. Kvalitatív- és kvantitatív elemzés. Hibalehetőségek, hibajelenségek felismerése és elhárításuk. GC-MS technikák és alkalmazásuk. GC-MS mérési eredmények értékelése.

Folyadékkromatográfia: A folyadékkromatográf felépítése, működése. HPLC technikák. Kolonnatípusok, kolonnatechnológia. Állófázisok kiválasztása. Izokratikus- és gradiens módszerek. Királis vegyületek elválasztása. HPLC módszerek fejlesztése, alkalmazása. Kromatográfias paraméterek meghatározása, számolása. Folyadékkromatográfok üzemeltetése. Adatgyűjtés, adatfeldolgozás. A legelterjedtebb adatrendszerek. Kvalitatív- és kvantitatív elemzés. Hibalehetőségek, hibajelenségek felismerése és elhárításuk. HPLC-MS technikák és alkalmazásuk. HPLC-MS mérési eredmények értékelése.

A méretkiszorításos (SEC, GPC, GFC) kromatográfia elve. Makromolekulák molekulatömegének meghatározási lehetőségei. Kolonnák felépítése és alkalmazásuk. Detektorok működésének fizikai-kémiai alapjai.

Alkalmazások: Környezeti minták mintaelőkészítése GC- és HPLC mérésekhez. Szilárd fázisú mikroextrakció és alkalmazási lehetőségei. GC, HPLC, GC-MS, HPLC-MS módszerek légköri aeroszolok, víz-, talajminták vizsgálatára. A mintaelőkészítés (vér, vizelet) GC- és

HPLC mérésekhez. Metabolitok meghatározása (példákkal illusztrált). Farmakokinetikai paraméterek meghatározása.

Ajánlott irodalom:

5. Balla József: A gázkromatográfia analitikai alkalmazásai, Budapest, 1997.
6. Fekete Jenő: Folyadékkromatográfia, Budapest (Jáva-98 Kft.) 2003.
7. Fekete Jenő: Gtakorlati útmutató a HPLC használatához, Budapest (Jáva-98 Kft.), 2005.
8. Dinya Zoltán: Szerves tömegspektrometria, DE, 2001.
9. L.R. Snyder, J.J. Kirkland, J.L. Glajch, Practical HPLC Method Development, Wiley Interscience, 1997.

MODERN GÁZ- ÉS FOLYADÉKKROMATOGRÁFIÁS ELJÁRÁSOK GYAKORLAT

Tantárgyfelelős: Deák György

A tárgy oktatója: Deák György, Kiss Attila, Krusper László

Óraszám/hét: 0+0+4

Periódus: 3. félév

Kreditszám: 3

Számonkérés módja: gyakorlati jegy

Javasolt előtanulmány: Modern gáz- és folyadékkromatográfias eljárások előadás

Tematika: (a kurzus célja, rövid tematikája)

A hallgatók megismerkednek egy (folyadék-) kromatográfias szoftver alapvető funkcióival. Megtanulják a minta előkészítésének alapjait SPE technika alkalmazása esetén. Elsajátítják a makromolekulák molekulatömegének kromatográfias meghatározási módját, megismerkednek a GC-MS technikák alkalmazásával szerves vegyületek szerekészletfelderítésében.

Vezérlő-kiértékelő szoftver (Solvent Manager System) bemutatása, használata. Analitikai eljárás kifejlesztése SPE módszer alkalmazásával. Kalibrációs görbe felvétele és koffein meghatározása teából, kávéból és üdítőitalokból. Kromatográfias paraméterek (felbontás, tányérszám) számítása kromatogramokból. Visszanyerési százalék mérése.

SEC kromatográf kalibrálása polisztirol standard minták segítségével. Teljes áteresztés és a teljes kizárás tartományának meghatározása. Ismeretlen polimer minta (PVC, PIB, vagy polisztirol) molekulatömegének meghatározása. Kromatográfias hibák szimulálása.

Ajánlott irodalom:

1. Zsuga Miklós: Makromolekuláris kémia, Egyetemi jegyzet, Debrecen, 2003
2. D. A. Skoog, J. J. Leary: Principles of instrumental analysis, Saunders Publishing, New York-Tokyo, 1992
3. G. Odian: Principles of polymerization, McGraw-Hill, New York, 1983.

A GYÓGYSZERGYÁRTÁS MINŐSÉGELLENŐRZÉSE ÉS ANALITIKÁJA

Tantárgyfelelős: Mihók Ildikó

A tárgy oktatója: Krusper László

Óraszám/hét: 0+0+4 Periódus 1.-2. félév

Kreditszám: 3

Számonkérés módja: gyakorlati jegy

Javasolt előtanulmány: BSc Analitikai kémia

A tárgy célja:

A hallgató képet kapjon a modern gyógyszergyártáshoz kapcsolódó analitikai tevékenységről.

Tematika: A gyógyszeripari minőségellenőrzés és analitikai módszereinek megismerése. Lehetőség van mind a gyógyszerhatóanyag-, mind a formulázott gyógyszergyártásnál alkalmazott technikák és szabályozó irányelvek megismerésére.

A GMP és GLP (Megfelelő gyártási és laboratóriumi eljárások) alapelvei, az analitikai eredmények dokumentálása, validitásuk ellenőrzése. Minősített standardok alkalmazása hatóanyag és szennyező tartalom meghatározásában. Gyógyszerkönyvi monográfiák alkalmazása a napi gyakorlatban. Analitikai módszerek kidolgozása, validálása. Laboratóriumi mérlegek, műszerek, berendezések kalibráltsága, illetve alkalmazhatóságának határai. Különböző mintaelőkészítési eljárások kidolgozása és alkalmazása.

Kromatográfiás módszerek fejlesztése. Napjainkban rutinszerűen használt kromatográfiás eljárások megismerése a gyakorlatban: HPLC (UV-látható, MS, fluoreszcens, törésmutató, elektrokémiai detektorokkal) UPLC (ultra nagy nyomású HPLC), GC, automatizált gőztér mintaadagoló-GC, GC-MS. Karl-Fischer technika alkalmazása a víztartalom meghatározásában. Potenciometrikus titrálások vizes és nem vizes közegben. Optikai spektroszkópia (UV-VIS, IR, NIR) alkalmazása azonosításban és hatóanyag tartalom meghatározásban. On-line ipari alkalmazás lehetőségei.

Szilárd gyógyszerformák (tabletták és kapszulák) fejlesztésének analitikai támogatása. A hatóanyagok gyógyszergyártásban fontos tulajdonságai és azok vizsgálata (polimorfia, szemcseméret, térfogattömeg). Gyógyszerforma vizsgálatok a késztermék fejlesztésben (kioldódás, szétesés, törési szilárdság, stb). Fejlesztési sarzsok stabilitási vizsgálatai és kivitelezésük. Kis mennyiségű szennyezők meghatározásának kihívásai a gyógyszerek analitikájában.

Ajánlott irodalom: A gyakorlat a TEVA Gyógyszeripari Kihelyezett Tanszékén kerül lebonyolításra. Az ajánlott irodalom specifikusan kötődik az elvégzendő feladathoz, és az oktatók által speciálisan kerül összeállításra.

5. Szintetikus vegyész specializáció

REAKCIÓMECHANIZMUSOK

Tantárgyfelelős: Somsák László

A tárgy oktatója: Somsák László

Óraszám/hét: 2 + 0 +0

Periódus: 2. félév

Kreditszám: 3

Számonkérés módja: K

Javasolt előtanulmány: Szerves kémiai szintézismódszerek I,

Tematika: (a kurzus célja, rövid tematikája)

A tárgy célja, hogy szemléletformáló jelleggel megismertesse a hallgatókat a szerves kémiai reakciók lefutásának és szelektivitási viszonyainak értelmezésére legkiterjedtebben alkalmazott módszerekkel: a) FMO elmélet; b) sztereoelektron effektusok; c) legkisebb mozgás elve. Az előadás e módszerek alkalmazásával mechanizmustípusonként (heterolitikus, homolitikus, periciklusos) keresztmetszetét adja a szerves reakcióknak a fő hangsúlyt a periciklusos és a homolitikus reakciókra és ezek gyakorlati felhasználására helyezve.

Rövid tematika: A határmolekulapályák fogalma, felhasználásuk kémiai reakciók leírására; a Klopman–Salem-egyenlet és értelmezése. A sztereoelektronhatás fogalma,

megnyilvánulásai. Baldwin-szabályok. A legkisebb mozgás elve, felhasználásai kémiai reakciók értelmezésében.

Periciklusos reakciók fogalma, típusai és az értelmezésükre alkalmazott módszerek (korrelációs diagramok szerkesztése; az FMO módszer alkalmazása). Elektrociklusos reakciók. Cikloaddíciós reakciók: normál- és fordított elektronszükségletű reakciók; a regio- és a sztereoszelektivitás értelmezése; Lewis-sav katalízis; pozíció- és periszelektivitás; 1,3-dipoláris cikloaddíció. Keletróp reakciók; szigmatróp átrendeződések. Oldószer-effektusok periciklusos reakciókban. Periciklusos reakciók biológiai rendszerekben. A periciklusos reakciók értelmezése az átmeneti állapot aromás jellege alapján.

A szabad gyökök fogalma, előállításuk módszerei. Kémiai iniciátorok. A szabad gyökök elemi reakciói. Láncreakciók és nem láncreakciók átalakítások. A szén gyökök termodinamikai és kinetikai stabilitása; a gyökcentrum szubsztituenseinek hatása. Szabad gyökök absztrakciós reakciói. Szabad gyökök addíciós reakciói. Szabad gyökök fragmentációja és átrendeződései. Gyökök szintetikus alkalmazása: a szelektivitási és a reaktivitási feltétel. Gyökös és ionos reakciók összehasonlítása a szintézis szempontjából. Reakciók gyökös jellegének megállapítása. A szerves fotokémiai reakciók alaptípusai.

Ajánlott irodalom:

1. Fleming, I. *Frontier Orbitals and Organic Chemical Reactions*, Wiley, 1976.
2. Rauk, A. *Orbital Interaction Theory of Organic Chemistry*, Wiley, 1994.
3. Deslongchamps, P. *Stereoelectronic Effects in Organic Chemistry*; Pergamon Press: Oxford, 1983.
4. Kirby, A. J. *Stereoelectronic Effects*; Oxford University Press: Oxford, 1996.
5. Giese, B. *Radicals in Organic Synthesis: Formation of Carbon-Carbon Bonds*; Pergamon Press: Oxford, 1986.

ASZIMMETRIÁS SZINTÉZISEK

Tantárgyfelelős: Kurtán Tibor

A tárgy oktatója: Kurtán Tibor

Óraszám/hét: 2 + 0 + 0

Periódus: 3. félév

Kreditszám: 3

Számonkérés módja: Kollokvium

Javasolt előtanulmány: Szerves kémiai szintézismódszerek I, Reakciómechanizmusok

Tematika: (a kurzus célja, rövid tematikája)

Kinetikus aszimmetriás transzformációk fogalma és típusai. Kinetikus rezolválás. Enzimkatalizált kinetikus rezolválás. Aszimmetriás elbontások. "Chiral pool", a legfontosabb királis kiindulási anyagok (aminosavak, hidroxisavak, alkaloidok, terpének, szénhidrátok) áttekintése. Funkciós csoport módosítással elérhető királis kiindulási és segédanyagok, enantiomertiszta/enantiomerben dúsult célvegyületek előállítása új sztereogén egység generálása nélkül. Aszimmetriás szintézisek alapelvei. Az aszimmetriás szintézisek típusai: első generációs (szubsztrát-kontrollált), második generációs (segédanyag-kontrollált), harmadik generációs (reagens-kontrollált) és negyedik generációs (katalizátor-kontrollált) eljárások. Többszörös sztereodifferenciálás. Enantioszelektív alkilezési reakciók. Enantioszelektív aldol kapcsolások. Enantioszelektív epoxidálás, dihidroxilezés, aminohidroxilezés, redukció. Organokatalízis.

Ajánlott irodalom:

1. E. L. Eliel, S. H. Wilen: *Stereochemistry of Organic Compounds*. Wiley, New York, 1994.
2. R. A. Aitken, S. N. Kilényi: *Asymmetric Synthesis*, Blackie Academic, London, 1992.

3. G. Procter: Stereoselectivity in Organic Synthesis, Oxford University Press, Oxford, 1998.
4. R. S. Ward: Selectivity in Organic Synthesis, Wiley, Chichester, 1999.

MODERN SZINTÉZISMÓDSZEREK A POLIMERKÉMIÁBAN

Tantárgyfelelős: Kéki Sándor

A tárgy oktatója: Kéki Sándor

Óraszám/hét: 2 + 0 + 0

Periódus: 3. félév

Kreditszám: 3

Számonkérés módja: kollokvium

Javasolt előtanulmány: -

Tematika: (a kurzus célja, rövid tematikája)

Kurzuscél: A hallgatók megismertetése a modern polimerkémiai alkalmazott szintézis módszerekkel és a kapott, különleges tulajdonságú anyagokkal.

Tematika: Levegőtől és víztől elzárt térben végzett munka laboratóriumi módszerei (pin to pin, dry-box, és vákuum line technikák). Ionos polimerizáció: a karbaniumos-, karbénium-ionos vegyületek szerkezete, stabilitása, sztereokémiája; az anionos és kationos polimerizációja kinetikája és mechanizmusa. Makromonomerek, makroiniciátorok, makroiniferterek. Polikondenzáció. Jól definiált rendszerek szintézis módszerei: az élő ionos polimerizáció; élő gyökös polimerizáció, atomtranszfer polimerizáció; blokk-kopolimerek, szabályozott szerkezetű polimerhálózatok. Polymerrendszerek: polimerlátexek stabilitása; emulziós és szuszpenziós polimerizáció.

Ajánlott irodalom:

1. Rempp P. and Merrill E. W.: Polymer synthesis, Hüthig and Wepf, Basel (1991)
2. Hsieh H. L. and Quirk R. P.: Anionic polymerization, Principles and practical applications, Mercel Dekker Inc., New York (1996)
3. Mishra M. K.: Macromolecular design, concept and practice, Polymer Frontiers International Inc., Hopewell Jct., New York (1994)
4. Alexandridis P. and Lindman B.: Amphiphilic block copolymers, Elsevier, Amsterdam (2000)

A FARMAKOLÓGIA ALAPVONALAI

Tantárgyfelelős: Pórszász Róbert

A tárgy oktatója: Pórszász Róbert

Óraszám/hét: 2 + 0 + 0

Periódus: 2. félév

Kreditszám: 3

Számonkérés módja: kollokvium

Javasolt előtanulmány:

Tematika: (a kurzus célja, rövid tematikája)

A tárgy célja az általános és a szervrendszerek farmakológiájának kémiai szemléletű tárgyalása, koncentrálva a hatásmechanizmusok és az egyes gyógyszercsoportok hatás-szerkezet összefüggéseinek ismertetésére.

Általános farmakológia. Farmakokinetika (felszívódás, eloszlás, metabolizmus, kiválasztás) általános ismérvei: biológiai hasznosíthatóság, bioekvivalencia, adagolás, adásmód, fehérjéhez kötődés, eloszlási tér, felezési idő, C_{max}, telítő dózis, fenntartó dózis,

klírens, fázis I, fázis II metabolikus reakciók. Farmakodinámia: Gyógyszerhatások molekuláris alapjai, a gyógyszerhatás targetjei, nem receptoriális gyógyszerhatás, receptoriális gyógyszerhatás, receptor farmakológia, receptor típusok, másodlagos hírvivő rendszerek, a Ca-jel és kontrakció, gyógyszer-receptor kölcsönhatások, affinitás, intrinszik aktivitás, agonizmus, antagonizmus (kompetitív, nem kompetitív), tartalék receptorok, deszenzitizáció és tachyfilaxia.

Az autonóm idegrendszer általános farmako-fiziológiája. Kolinerg transzmisszió (M és N receptorok), noradrenerg transzmisszió (α és β receptorok), a nitrogén monoxid, autakoidok.

A szív és érrendszer farmakológiája. Antiarrhythmiaszerek, antianginás szerek, pozitív inotróp hatású szerek, símaizomra ható szerek.

Húgyhajtók farmakológiája. Antihiperlipidémiaszerek. Véralvadásra ható szerek. Vérképzésre ható szerek. A gyulladás farmakológiája. Asthma bronchiale és a légzőrendszerre ható szerek. A gastrointestinális apparátust befolyásoló hatóanyagok. Endokrin farmakológia alapjai (obesitas, diabetes mellitus, pajzsmirigy és az ivarszervek farmakológiája).

Központi idegrendszerre ható szerek (Antiepileptikumok, szedatohipnotikumok, általános és helyiérzéstelenítők, Parkinson betegség, Alzheimer kór, antipszichotikumok, kábító fájdalomcsillapítók).

Antibakteriális, antivirális, antifungális és antiprotozoon kemoterápia alapjai. Daganatkemoterápia.

Ajánlott irodalom:

1. H. P. Rang, M. M. Dale, J. M. Ritter, P. K. Moore: Pharmacology, Fifth edition, Churchill Livingstone, 2003.
2. B. G. Katzung: Basic & Clinical Pharmacology, Ninth edition, McGraw-Hill, 2003.
3. Goodman & Gilman's The Pharmacological Basis of Therapeutics, Tenth edition, McGraw-Hill, 2001.
4. D. A. Williams, T. L. Lemke, W. O. Foye: Foye's Principles of Medicinal Chemistry, Lippincott Williams & Wilkins; fifth edition, 2002
5. T. L. Lemke: Review of Organic Functional Groups: Introduction to Medicinal Organic Chemistry. Lippincott Williams & Wilkins; fourth Bk&Cdr edition, 2003.

MODERN GÁZ- ÉS FOLYADÉKKROMATOGRÁFIÁS ELJÁRÁSOK

Tantárgyfelelős: Deák György, Kiss Attila

A tárgy oktatója: Kiss Attila, Deák György

Óraszám/hét: 2+0+0 Periódus: 2. félév

Kreditszám: 3

Számonkérés módja: kollokvium

Javasolt előtanulmány:.

Tematika:(a kurzus célja, rövid tematikája):

Gázkromatográfia: Gázkromatográfok felépítése, működése (mintaadagolási lehetőségek, detektortípusok). Kolonnatípusok, kolonnatechnológia. Gázkromatográfias módszerek fejlesztése, alkalmazása. Kolonnatípus kiválasztás, a különböző gyártók által forgalmazott kolonnák felcserélhetősége. Kromatográfias paraméterek meghatározása, számolása. Gázkromatográfok üzemeltetése. Adatgyűjtés, adatfeldolgozás. A legelterjedtebb integrátorok és adatrendszerek. Kvalitatív- és kvantitatív elemzés. Hibalehetőségek, hibajelenségek felismerése és elhárításuk. GC-MS technikák és alkalmazásuk. GC-MS mérési eredmények értékelése.

Folyadékkromatográfia: A folyadékkromatográf felépítése, működése. HPLC technikák. Kolonnatípusok, kolonnatechnológia. Állófázisok kiválasztása. Izokratikus- és gradiens módszerek. Királis vegyületek elválasztása. HPLC módszerek fejlesztése, alkalmazása. Kromatográfias paraméterek meghatározása, számolása. Folyadékkromatográfok üzemeltetése. Adatgyűjtés, adatfeldolgozás. A legelterjedtebb adatrendszerek. Kvalitatív- és kvantitatív elemzés. Hibalehetőségek, hibajelenségek felismerése és elhárításuk. HPLC-MS technikák és alkalmazásuk. HPLC-MS mérési eredmények értékelése.

A méretkiszorításos (SEC, GPC, GFC) kromatográfia elve. Makromolekulák molekulatömegének meghatározási lehetőségei. Kolonnák felépítése és alkalmazásuk. Detektorok működésének fizikai-kémiai alapjai.

Alkalmazások: Környezeti minták mintaelőkészítése GC- és HPLC mérésekhez. Szilárd fázisú mikroextrakció és alkalmazási lehetőségei. GC, HPLC, GC-MS, HPLC-MS módszerek légköri aeroszolak, víz-, talajminták vizsgálatára. A mintaelőkészítés (vér, vizelet) GC- és HPLC mérésekhez. Metabolitok meghatározása (példákkal illusztrált). Farmakokinetikai paraméterek meghatározása.

Ajánlott irodalom:

1. Balla József: A gázkromatográfia analitikai alkalmazásai, Budapest, 1997.
2. Fekete Jenő: Folyadékkromatográfia, Budapest (Jáva-98 Kft.) 2003.
3. Fekete Jenő: Gtakorlati útmutató a HPLC használatához, Budapest (Jáva-98 Kft.), 2005.
4. Dinya Zoltán: Szerves tömegspektrometria, DE, 2001.
5. L.R. Snyder, J.J. Kirkland, J.L. Glajch, Practical HPLC Method Development, Wiley Interscience, 1997.

MODERN GÁZ- ÉS FOLYADÉKKROMATOGRÁFIÁS ELJÁRÁSOK GYAKORLAT

Tantárgyfelelős: Deák György

A tárgy oktatója: Deák György és Kiss Attila

Óraszám/hét: 0+0+4

Periódus: 3. félév

Kreditszám: 3

Számonkérés módja: gyakorlati jegy

Javasolt előtanulmány: Modern gáz- és folyadékkromatográfias eljárások előadás

Tematika: (a kurzus célja, rövid tematikája)

A hallgatók megismerkednek egy (folyadék-) kromatográfias szoftver alapvető funkcióival. Megtanulják a minta előkészítésének alapjait SPE technika alkalmazása esetén. Elsajátítják a makromolekulák molekulatömegének kromatográfias meghatározási módját, megismerkednek a GC-MS technikák alkalmazásával szerves vegyületek szerekzetfelderítésében.

Vezérlő-kiértékelő szoftver (Solvent Manager System) bemutatása, használata. Analitikai eljárás kifejlesztése SPE módszer alkalmazásával. Kalibrációs görbe felvétele és koffein meghatározása teából, kávéból és üdítőitalokból. Kromatográfias paraméterek (felbontás, tányérszám) számítása kromatogramokból. Visszanyerési százalék mérése.

SEC kromatográf kalibrálása polisztirol standard minták segítségével. Teljes áteresztés és a teljes kizárás tartományának meghatározása. Ismeretlen polimer minta (PVC, PIB, vagy polisztirol) molekulatömegének meghatározása. Kromatográfias hibák szimulálása.

Ajánlott irodalom:

Zsuga Miklós: Makromolekuláris kémia, Egyetemi jegyzet, Debrecen, 2003

D. A. Skoog, J. J. Leary: Principles of instrumental analysis, Saunders Publishing, New York-Tokyo, 1992

G. Odian: Principles of polymerization, McGraw-Hill, New York, 1983.

NAGYHATÉKONYSÁGÚ SZINTÉZISTECHNIKÁK, PARALEL MÓDSZEREK

Tantárgyfelelős: Kónya Krisztina

A tárgy oktatója: Kónya Krisztina

Óraszám/hét: 0+1+3

Periódus: 4. félév

Kreditszám: 3

Számonkérés módja: gyakorlati jegy

Javasolt előtanulmány: Szerves kémiai szintézismódszerek I, II.

Tematika: (a kurzus célja, rövid tematikája)

A kombinatorikus kémia kialakulása, hatékonyság szerepe a gyógyszerkutatásban és fejlesztésben. Ortodox és paralel szintézis, vegyületkönyvtárak. „Split-and-mix” technika. Oldat- és szilárdfázisú szintézismódszerek, előnyeik és hátrányaik. Gyantán kötött reagensek használata. A termékek szerkezetének meghatározása. Aktivitásvizsgálat oldatban és szilárdfázison. Robotizált szintézisek, multicSATornás szintetizáló robotok. Információs technológia, adatfeldolgozás. Szerves kémiai, gyógyszerkémiai, anyagtudományi alkalmazások. Mikrohullámú aktiválás, szerepe a szerves- és gyógyszerkémiaiban. Elméleti háttér áttekintése. Mikrohullámmal aktivált oldat- és oldószermentes reakciók. Mikrohullámú berendezések ismertetése, alkalmazási technikák. Alkalmazások szerves kémiai szintézisekben (pl. kondenzációk, gyűrűzárások, Heck-reakció, Mitsunobu-reakció, C-C és C-heteroatom kötések kialakítása).

Ajánlott irodalom:

1. Bata Imre, Hermecz István: Kombinatorikus kémia, Akadémiai Kiadó, Budapest, 2000
2. C. O. Kappe, A. Stadler: Microwaves in Organic and Medicinal Chemistry, Wiley-VCH, Weinheim, 2005.
3. G. Jung, Combinatorial chemistry, Wiley-VCH, Weinheim, 1999.

2D NMR MÓDSZEREK

Előfeltétel: TKML0004 vagy TKBL0004 – NMR operátor (kezdő)

Tantárgyfelelős: Kövér Katalin

A tárgy oktatója: Kövér Katalin

Óraszám/hét: 0+2+2

Periódus: 3. félév

Kreditszám: 3

Számonkérés módja: gyakorlati jegy

Javasolt előtanulmány: Szerkezetvizsgáló módszerek, NMR Operátor 1.

Tematika: (a kurzus célja, rövid tematikája)

A képzés célja, hogy a résztvevők megismerjék a fontosabb 2D NMR módszereket. Az elméleti alapok rövid ismertetése (felelevenítése) után (1 óra), a hallgatók egy adott szerkezeti probléma megoldására alkalmazzák a gyakorlaton bemutatott mérés technikákat. A 2 órás gyakorlat célja, hogy a hallgatók elsajátítsák az önálló méréshez és probléma megoldáshoz szükséges alapvető ismereteket. A gyakorlat felvételének előfeltétele a bevezető NMR operátor képzési gyakorlat sikeres teljesítése. Bemutatásra kerülő 1D NMR módszerek: szelektív TOCSY, szelektív NOE, Watergate kísérlet. Bemutatásra kerülő 2D NMR technikák: COSY, TOCSY, NOESY, ROESY, HSQC, HMBC.

Ajánlott irodalom:

1. P. J. Hore, Mágneses Magrezonancia (fordította: Dr. Szilágyi László, Nemzeti Tankönyvkiadó)
2. T. D. W. Claridge, High-Resolution NMR Techniques in Organic Chemistry, Elsevier Ltd. 1999

3. A. E. Derome, Modern NMR Techniques for Chemistry Research, Pergamon Press, Oxford, 1987
4. S. Berger, S. Braun, 200 and More NMR Experiments. A practical course, Wiley-VCH, 2004

NMR OPERÁTOR KÉPZÉSI GYAKORLAT II.

Előfeltétel: TKML0004 vagy TKBL0004 – NMR operátor (kezdő)

Tantárgyfelelős: Kövér Katalin

A tárgy oktatója: Kövér Katalin

Óraszám/hét: 0+0+2 Periódus: 2-4. félév

Kreditszám: 2

Számonkérés módja: Gyakorlati jegy

Javasolt előtanulmány: NMR operátor képzési gyakorlat I.

Tematika: (a kurzus célja, rövid tematikája): A gyakorlat célja, hogy a hallgatók elsajátítsák az önálló méréshez és probléma megoldáshoz szükséges alapvető ismereteket. A gyakorlat felvételének előfeltétele a bevezető NMR operátor képzési gyakorlat sikeres teljesítése. 2D NMR technikák: COSY, TOCSY, NOESY, ROESY, HSQC, HMBC.

Ajánlott irodalom:

1. P. J. Hore, Mágneses Magrezonancia (fordította: Dr. Szilágyi László, Nemzeti Tankönyvkiadó)
2. T. D. W. Claridge, High-Resolution NMR Techniques in Organic Chemistry, Elsevier Ltd. 1999
- A. E. Derome, Modern NMR Techniques

GLIKOBIOKÉMIA

Tantárgyfelelős: Szurmai Zoltán

A tárgy oktatója: Szurmai Zoltán, Kerékgyártó János

Óraszám/hét: 2+0+0

Kreditszám: 3

Számonkérés módja: kollokvium

Javasolt előtanulmány: Biokémia I.

Tematika: (a kurzus célja, rövid tematikája)

Szénhidrátok előfordulása. Glikokonjugátumok (glikolipidek, glikoproteinek, peptidoglikánok). A szénhidrátokban tárolt biológiai információ - a glikobilógia. A baktériumok, a vírusok, a tumorsejtek és a humán szervezet sejtfelszíni szénhidrátjainak szerkezete és a betegségek közötti kapcsolat - a glikopatológia. Modern módszerek oligoszacharidok szintézisére.

Ajánlott irodalom:

1. Glycoscience – Chemistry and Chemiocal biology, Springer Verlag, 2001.
2. Essentials of Glicobiology, Cold spring Harbor, New York, 1999.
3. J.M. Berg, J.L. Tymoczko, L. Stryer, Biochemistry, W.H. Freeman and Co., 2002.

MOLEKULATERVEZÉS

Tantárgyfelelős: Keserű György Miklós

A tárgy oktatója: Keserű György Miklós

Óraszám/hét: 2+0+0

Periódus: 4. félév

Kreditszám: 3

Számonkérés módja: kollokvium

Tematika: (a kurzus célja, rövid tematikája)

A tárgy célja, hogy szemléletformáló jelleggel megismertesse a hallgatókat a számítógéppel segített molekulatervezésben legkiterjedtebben alkalmazott módszerekkel: a) molekulamechanika és konformációs analízis; b) kvantitatív szerkezet-hatás összefüggések; c) makromolekuláris számítások. Az előadás bemutatja a legfontosabb eljárásokat elsődleges hangsúlyt helyezve ezek gyakorlati, elsősorban gyógyszeripari felhasználására.

A kurzus részletes tematikája:

Bevezetés a gyógyszerkutatásba. A gyógyszertervezés fejlődése napjainkig. Molekulaszerkezeti modellek építése számítógéppel. A molekula geometriai alapfogalmak és sztereokémiai matematikai leírása. A molekulamechanika elméleti alapjai. A molekula mechanika alapegyenletei, az energiaszámítás részletei. Bevezetés az erőtér alapú konformációs analízisbe. Hatás-szerkezet összefüggés vizsgálatok. QSAR-modellek (Free-Wilson analízis, Hansch analízis, COMFA analízis). Szerkezet alapú tervezés, dokkolás. ADME paraméterek számítása. Virtuális szűrővizsgálatok a gyógyszerkutatásban.

Gyakorlati bemutató: QSAR modellek alkalmazása a modern gyógyszerkutatásban. Dokkoló programok. Virtuális szűrés.

1. Ajánlott irodalom:

1. Keserű György Miklós, Náray-Szabó Gábor: Molekulamechanika, A kémia újabb eredményei 80. kötet, Akadémiai Kiadó, 1995
2. György M. Keserű, István Kolossváry: Molecular Mechanics and Conformational Analysis in Drug Design, Blackwell Science, 1999
3. Keserű György Miklós, Kolossváry István: Bevezetés a számítógépes gyógyszertervezésbe, A kémia újabb eredményei 99. kötet, Akadémiai Kiadó, 2006

SZÉNHIDRÁTKÉMIA

Tantárgyfelelős: Somsák László

A tárgy oktatója: Somsák László

Óraszám/hét: 2 + 0 + 0

Periódus: 4. félév

Kreditszám: 3

Javasolt előtanulmány: Szerves kémiai szintézismódszerek I,

Számonkérés módja: kollokvium

Tematika: (a kurzus célja, rövid tematikája)

A tárgy célja a biológiai és ipari szempontból egyre fontosabbá váló szénhidrátok és származékaik sajátosságainak bemutatása, alapismeretek nyújtása haladottabb kémiai és biokémiai stúdiumokhoz, a szénhidráttudomány (glycoscience) megismerésének kezdeti lépéseire. Súlypontok: szénhidrátok szerepei biológiai rendszerekben, felhasználási lehetőségeik; szerkezeti sajátosságok és ezek felderítése különös tekintettel a modern szerkezetvizsgálati módszerek alkalmazására; jellegzetes reakcióik; védőcsoportok és alkalmazásuk; szintetikus szempontból fontos származékok előállítása.

A szénhidrátok előfordulása, biológiai funkcióik. A szénhidrátok csoportosításai, felhasználási lehetőségeik. Monoszacharidok konstitúciója, konfigurációja, és ábrázolásai. A

szénhidrátok nevezéktanának alapjai. Oligo- és poliszacharidok szerkezeti sajátosságai. A mikroheterogenitás. Műszeres szerkezetvizsgálati módszerek szénhidrátkémiai alkalmazásai (Röntgen, UV, IR, MS). Az NMR spektroszkópia alkalmazása szénhidrátok szerkezetének megállapítására. Optikai rotációs módszerek a szénhidrátok szerkezetvizsgálatában. Monoszacharidok konformációs analízise. Az anomer effektusok (endo-, exo-, és inverz-) és általánosításuk. Szabad cukrok átalakulásai vizes közegben; oxidációjuk, redukciójuk; reakcióik N, S, és C-nukleofilekkel. Szabad cukrok reakciói alkoholokkal: glikozidok képződése és hidrolízise. Szénhidrát észterek és éterek. Szénhidrát acetálok és ketálok. Peracilezett monoszacharidok előállítása és reakcióik. Glikozil-halogenidek előállítása és reakcióik. Telítetlen kötések kialakítása szénhidrátokban. Újabb karbonilcsoport kialakítása szénhidrátokban. Nukleofil szubsztitúciók a nem anomer szénatomokon; epoxidok előállítása és gyűrűnyitások.

Ajánlott irodalom:

1. Levy, D. E.; Fügedi, P. *The Organic Chemistry of Sugars*; CRC Press: Boca Raton, 2006.
2. Lindhorst, T. K. *Essentials of Carbohydrate Chemistry*; Wiley-VCH: Weinheim, 2000.
3. Collins, P. M.; Ferrier, R. J. *Monosaccharides - Their Chemistry and Their Roles in Natural Products*; John Wiley & Sons: Chichester, 1995.

NÖVÉNYVÉDŐSZEREK KÉMIÁJA

Tantárgyfelelős: Kurtán Tibor

A tárgy oktatója:

Óraszám/hét: 2 + 0 + 0

Periódus: 4. félév

Kreditszám: 3

Számonkérés módja: kollokvium

Javasolt előtanulmány: Szerves kémiai szintézismódszerek I

Tematika: (a kurzus célja, rövid tematikája)

A tárgy célja a mezőgazdaságban használatos növényvédőszer legfontosabb csoportjainak áttekintése, az egyes hatásterületek legjellemzőbb kémiai struktúráinak és néhány típusintézisnek ismertetése, hatás-szerkezet összefüggések, valamint a hatásmechanizmusok alapjainak bemutatása.

Növényvédőszer-kémiai alapfogalmak, a peszticidek hatásterület szerinti csoportosítása, legfontosabb formulázási módszerek. Rovarölő (inszekticid) és egyéb állati kártevők elleni (larvicid, miticid, akaricid stb.) szerek. Gombaölő szerek (fungicid). Szervetlen vegyületek, szerves fémvegyületek, kéntartalmú szerek. Egyéb fungicid molekulák (karboxanilidek, imidek, triazol- és imidazol-származékok stb.), antibiotikumok. Gyomirtók (herbicid) és növényi növekedés szabályzók (amidok, szénsavszármazékok, difenil-éterek), N-heterociklusos szerek stb.). Antidótumok. Rovarölő inszekticid és egyéb állati kártevők elleni (larvicid, miticid, akaricid, stb.) szerek. Klasszikus hatóanyagcsoportok (klórozott szénhidrogének, foszforsavszármazékok, karbamátok, stb). Piretroidok, hormonális kontroll lehetőségek. Feromonok. Kvalitatív és kvantitatív hatás-szerkezet összefüggések. Változások a szercsaládok és a fő hatásterületek közötti megoszlásban, a hatóanyagfejlesztés fő irányai, perspektívái. Enantiomertiszta hatóanyagok.

Ajánlott irodalom:

1. Loch J., Noszticzius Á.: *Agrokémia és növényvédelmi kémia*, Mezőgazdasági Kiadó, Budapest, 1992.
2. K. A. Hassall: *The Biochemistry and Uses of Pesticides*, MacMillan, London, 1990.
3. K. H. Büchel (ed.): *Chemistry of Pesticides*, Wiley, New York, 1983.

4. R. J. Cremllyn: Agrochemicals. Preparation and Mode of Action. Wiley, Chichester, 1991.

6. Radiokémikus vegyész specializáció

RADIOANALITIKA (TKME0614, TKML0614 az előadás anyaga az analitika specializáció TKME0523 tárgyával azonos)

Tantárgyfelelős: Nagy Noémi

A tárgy oktatója: Nagy Noémi, Nemes Zoltán

Óraszám: 2+0+3

Kreditszám: 5

Számonkérés módja: kollokvium és gyakorlati jegy

Tematika: (a kurzus célja, rövid tematikája)

A kurzus során a hallgatók megismerik a sugárzások alkalmazását a kémiai analízisben, a roncsolásmentes és roncsolásos anyagvizsgálatokat, radioizotópokkal ill. sugárzás-anyag kölcsönhatásán alapuló kvalitatív és kvantitatív elemzési módszereket, a kémiai formák és az anyagszerkezet vizsgálatát radioaktív módszerekkel ill. sugárzásokkal. Példákat látnak a környezetvédelemben, iparban, mezőgazdaságban, orvosi, biológiai felhasználások területén.

Elmélet:

1. A mag-, atom- és részecskesugárzások keletkezése és kölcsönhatása az anyaggal
2. A radioanalitikában használatos mérés technikák
3. Természetes radioaktivitáson alapuló radioanalitikai módszerek: koncentráció, földtörténeti és történeti korok meghatározása
4. Az izotópok szeparálódásának oka, a szeparálódás alapján szereszhető fizikai, kémiai, geológiai, biológiai információk
5. Radioanalitika mesterséges radionuklidokkal: a nuklidok kiválasztásának szempontjai, előállítása
6. Kémiai analitikai módszerek: izotóphígításos analízis, radiometrikus titrálás, radiogravimetria
7. Radiokémiai elválasztási, tisztítási módszerek
8. Radioanalitika az élő szervezetben: in vitro és in vivo módszerek
9. Radioanalitika ipari méreteken
10. Sugárzás és anyag kölcsönhatásán alapuló analitikai és szerkezetvizsgáló módszerek: csoportosításuk és jellemzésük a gerjesztő és keletkező sugárzás, a behatolási mélység (tömbfázis ill. felületek analitikája) és a kapott analitika információk alapján
11. Neutronok felhasználása az analitikában: aktivációs analitikai módszerek, neutronszerzés és változatai, neutronabszorpció
12. Nagy energiájú elektromágneses sugárzások (röntgen- és gamma-sugárzás) alkalmazása az analitikában: röntgenfluoreszcencia analízis, Mössbauer-spektroszkópia, röntgengerjesztéses elektronspektroszkópia
13. Béta- és elektronsugárzás és az anyag kölcsönhatásán alapuló analitikai módszerek: béta-visszaszerzés, elektronmikroszkópok és mikroszondák
14. Ionok és anyag kölcsönhatásán alapuló analitikai módszerek: Rutherford-szerzés, részecskebombázással kiváltott röntgensugarak spektroszkópiája

Gyakorlatok:

1. Látogatás a Paksi Atomerőmű Vegyészeti Osztályán – az atomerőmű kémiai analitikai feladatai
2. Látogatás a Bataapáti Nemzeti Radioaktív Hulladéktárolóban – a hulladékéltőkészítés és tárolás megtekintése, sugárvédelmi, monitorozási feladatok
3. Látogatás a Izotóp Intézet Kft-nél, a KFKI atomreaktorának megtekintése, folyadékszintillációs spektrometriai mérés
4. Látogatás a MTA Energiatudományi Kutatóintézetben: neutronaktivációs analitikai gyakorlat
5. Látogatás a MTA Energiatudományi Kutatóintézetben: transzurán elemek meghatározása ICP-MS technikával

Ajánlott irodalom:

1. Kónya J., Nagy N.: Izotópia I. és II., Kossuth Egyetemi Kiadó, Debrecen, 2007. és 2008.
2. Kónya J., M. Nagy N.: Nuclear and Radiochemistry, Elsevier, Oxford, 2012.
3. Tölgyessy J.: Magsugárzás a kémiai analízisben, Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1965.
4. D.De Soete, R. Gijbels, J. Hoste: Neutron activation analysis, Wiley-Interscience, London, 1983.
5. H.A. Das, A. Faanhof, H.A. van der Sloot: Environmental Radioanalysis, Elsevier, Amsterdam, 1983.
6. A. Vértes, S. Nagy, Z. Klencsár: Handbook of nuclear chemistry, Kluwer Academic Publishers, Boston, 2003.

NUKLEÁRIS KÖRNYEZETVÉDELEM

Tantárgyfelelős: Dr. Molnár Mihály

A tárgy oktatói: Dr. Molnár Mihály, Dr. Palcsu László, Dr. Kovács Zoltán

Óraszám: heti 2 óra elmélet

Kreditszám: 3

Számonkérés módja: kollokvium

Nukleáris létesítmények környezeti hatásai

1. Atomreaktorokkal kapcsolatos környezetterhelési kérdések, hulladékok kezelése és tárolása. A jelenleg működő, II. generációs reaktorok: könnyűvízes (PWR, BWR), nehézvízes (CANDU), grafitmoderátoros reaktorok környezeti hatásai. Radioaktív hulladékok keletkezése az erőművek normál működése során. A hulladékok kezelése: azonnali kibocsátás - hígítás és szétszórás; késleltetett kibocsátás - koncentráció és szétszóródás. Az azonnali kibocsátás során fellépő környezeti hatások. Tervezett és nem tervezett kibocsátások. Atomerőmű-típusok környezeti hatásainak összevetése.
2. Új típusú atomreaktorok, csökkentett környezeti terheléssel és fokozott biztonsággal - áttekintés. A ma és a közeljövő típusainak környezeti hatásai (2010-2015), III. és III.+ generációs reaktorok: továbbfejlesztett forralóvízes reaktorok, továbbfejlesztett nyomottvízes reaktorok, integrált primerkörű reaktorok, moduláris magas hőmérsékletű gázhűtésű reaktorok, továbbfejlesztett CANDU reaktorok. A jövő reaktorainak környezeti hatásai: IV. generációs reaktorok. Fenntarthatóság, gazdaságosság, biztonság.
3. A már üzemelő- vagy hamarosan üzemelő hulladéklerakók globális áttekintése. A radioaktív hulladékok elhelyezésének szempontjai. A radioaktív hulladékok osztályozása. Hulladékok kezelése, kondicionálás, tömörítés. Ideiglenes tárolás, végleges elhelyezés. Tároló típusok áttekintése – nemzetközi gyakorlat. Hazai hulladéktárolók.

4. Reaktor-diagnosztika nemesgázizotópokkal. A fűtőelemekben keletkező hasadási termékek. A reaktor hűtőkörében megjelenő nemesgázizotópok szerepe a fűtőelem-tokozás meghibásodásának korai felismerésében. Mintázás, nemesgázok koncentrációjának és izotóp-összetételének mérése.
5. Radioaktív hulladék-minősítés fizikai módszerei, „nehezen mérhető” izotópok. Hosszú felezési idejű ($T_{1/2} > 30$ év) izotópok jelentősége a kis és közepes aktivitású hulladékok végleges elhelyezése szempontjából. A tisztán béta- vagy alfasugárzó izotópok aktivitáskoncentráció-mérésének problémái. Radiokémiai elválasztási módszerek T, ^{14}C , ^{36}Cl , ^{99}Tc , ^{129}I , ^{108}Ag és más „nehezen mérhető” izotópok meghatározásához. Folyadékszintillációs méréstechnika.
6. Gázképződés problémája a radioaktív hulladékok tárolása során. Gázképződés jelentősége a végleges tárolás során. Gázképződési folyamatok: korrózió, biodegradáció, radiolízis. Modellkísérletek. Gázképződés valós hulladékokban. Gázképződés sebességének mérése. A gázképződés hatása a tároló biztonságára.

Légköri- és talajvíz figyelő módszerek, eszközök és tapasztalatok

Nukleáris létesítmények tervezett és nem tervezett kibocsátásai. Légköri kibocsátás ellenőrzése: trícium, ^{14}C , nemesgázok, aeroszolok mintázása az atomerőmű, illetve a hulladékkezelő létesítmények kéményeiben.

Környezeti hatás vizsgálata: talaj, növényzet, aeroszolok, a környezeti levegő ^{14}C és trícium tartalmának ellenőrzése. Mintavételek, mintavételi eljárások és alkalmazott mérési módszerek.

Nem tervezett kibocsátások ellenőrzése, talajvíz monitoring hálózat. Monitoring berendezések, mintavétel, mintafeldolgozás, méréstechnikák, kiértékelés. Modellszámítások a szivárgási helyek azonosítására.

Ciklotronra alapozott diagnosztikai vizsgálatok környezetvédelmi szempontjai

Az ciklotron működési elve, a ciklotronok elterjedtsége Magyarországon és a világban. A ciklotron összehasonlítása az atomreaktorral a hulladékok keletkezése, fajtája, kezelése és tárolása szempontjából. A szilárd hulladékok kezelése, ideiglenes tárolása és végleges elhelyezése. Folyadék és gázhulladékok kezelése, a nagyobb radioaktív tartalmú folyadékok hígítása, a környezetbe kéményen és csatornarendszeren keresztül kibocsátható mennyiség. A hosszabb felezési idejű radioizotópokat tartalmazó folyadékok kezelése. A radioaktív izotópokat és radiofarmakonokat előállító berendezések meghibásodásai, intézkedések az ebből adódó radioaktív kontamináció esetén.

RADIOAKTÍV IZOTÓPOK ORVOSI ALKALMAZÁSÁNAK ALAPJAI

Tantárgyfelelős: Prof. Dr. Galuska László

Oktatók: Balkay László, Fodor Zoltán, Dr Garai Ildikó, Dr Szabados Lajos

Óraszám/hét: 2

kredit:3

Számonkérés módja: kollokvium

Az előadások célja a BSc alapkursusra épülve ismeretek szerzése a klinikai nukleáris medicina eszközparkjáról, diagnosztikai és terápiás vizsgálóeljárásairól, az eljárások során használt izotópok- radiofarmakonok tükrében.

A témakör első előadásblokkjában az in vivo humán izotópvizsgálatokra alkalmas gammasugarak detektálását szolgáló fizikai eszközöket ismertetik. A leképezés alapját képező kristály és félvezető detektorok mellett a hagyományos és PET kamerák és CT vel kombinált

multimodalitású eszközöket is bemutatják. Ismertetik a képbegyűjtés, feldolgozás kiértékelés és archiválás alapjait.

A következő előadásokban a klinikai diagnosztikai és terápiás eljárásokat ismertetik. Ennek során mindazok az egyfotonos, és kétfotonos (PET) diagnosztika eljárásokat bemutatják, amelyek betegellátási vagy tudományos kutatási szempontból jelentőséggel bírnak.

Az előadások bemutatják a vizsgálatok előkészítését, radiofarmakonjait, a képbegyűjtés módját és a kiértékelés menetét. Ismertetik a képfeldolgozás legfontosabb lépéseit és a kapott eredmények értékét a klinikai diagnosztikai munkában. Sorrendben:

- A központi idegrendszer (agy) és az endokrin rendszer izotóp vizsgálata, terápiás radiofarmakonjai, eljárásai.
- a szív és tüdő vizsgálata izotópdiagnosztikai módszerekkel.
- a gastrointestinalum funkciójának izotópos vizsgálatai.
- a veseműködés statikus és dinamikus leképező eljárásai, radiofarmakonjai, technikái.
- az onkológiai kórképek diagnosztikai izotópvizsgálatai. A SPECT és PET-CT multimodalitású technikákkal készült vizsgálatok eseteken illusztrált bemutatása.

Röviden bemutatják az izotóp terápiás eljárásokat, Ennek során kiemelésre kerülnek az alkalmazott radiofarmakonok, azok dózissai, alkalmazásuk előnyei és korlátai.

Előadások szólnak majd az izotóp-diagnosztikában használatos műszerekről, melyben az előadók kihangsúlyozzák a gamma-sugárzáson alapuló képalkotás fontosságát, ismertetik a gamma kamerák felépítését, a tomográfiai képalkotás alapelveit. A hallgatók megismerik a single foton emissziós tomográfia (SPECT) elvét és működését, a vizsgálati protokollokat.

Ismereteket kapnak a pozitron emissziós tomográfia (PET) elvéről és a PET kamerák típusairól, a kvantitatív vizsgálatok megvalósításáról PET kamerával. Megismerkednek a multimodális leképezéstechnika eszközeivel, a SPECT/CT és PET/CT kamerákkal.

A befejező blokkban a nukleáris medicina munkahelyek összetettségét, a minőségbiztosítási munka módjait, jelentőségét mutatják be az előadók.

Ajánlott irodalom:

- 1-„Nukleáris Medicina” elektronikus tankönyv szerkesztője Varga József (<http://www.nmc.dote.hu/nmtk>), 2007 és 2008
- 2-„Biológiai izotóptechnika” egyetemi és főiskolai tankönyv Varga József 2006:
- 3-A nukleáris medicina tankönyve; Szerk.: Szilvási István 2002

RADIOAKTÍV IZOTÓPOK ELŐÁLLÍTÁSA

Tantárgyfelelős: Kertész István

Oktatók: Mikecz Pál, Pótári Norbert

Óraszám/hét: 2 (1 előadás + 1 gyakorlat)

Kredit 2

Számonkérés módja: írásbeli teszt (kollokvium vagy gyakorlati jegy?)

A kurzus célja:

A mesterséges radioizotópok előállításához szükséges fizikai és kémiai alapismeretek elsajátítása

Tematika:

1. Atomreaktorok és egyéb neutron források
2. Részecske gyorsítók.

3. Magreakciók létrejöttének feltételei.
4. Az aktiválás időtörvényei, gerjesztési függvények
5. Céltárgyak kialakítása, szilárd, folyadék és gáz targetek
6. Neutron többletes izotópok előállítása.
7. Neutronhiányos izotópok előállítása
8. PET izotópok előállítása
9. Az előállított izotópok elválasztása a célsanyagokból
10. Ultrarövid felezési idejű izotópokkal jelzett vegyületek előállítása

Ajánlott irodalom:

1. G. Stöcklin, V. Pike: Radiopharmaceuticals for Positron Emission Tomography
2. Cyclotron produced radionuclides, Physical characteristics and production IAEA TECHNICAL REPORTS SERIES No. 468 ISBN 978-92-0-106908-5
3. Nagy Lajos György, Nagyné László Krisztina, Radiokémia és izotóptechnika (Műegyetemi Kiadó, 1997)
4. Michael J. Welch, Carol S. Redvanly: Handbook of radiopharmaceuticals: radiochemistry and applications

JELZETT VEGYÜLETEK ELVÁLASZTÁSTECHNIKÁJA

Tantárgyfelelős: Jószai István

Oktatók: Jószai István, Szikra Dezső

Óraszám/hét: (2 előadás + 2 gyakorlat)

Kredit: 4

Számonkérés módja: kollokvium

A kurzus célja:

A radiokémia területén alkalmazott elválasztás-technikai módszerek részletes ismertetése.

Tematika:

1. A radiokémia területén fellépő alapvető elválasztás-technikai problémák.
2. Oldószereltávolítása, bepárlás, liofilizálás, oldószercseré.
3. Szilárd anyagok eltávolítása oldatokból. Szűrés, centrifugálás.
4. Extrakció. SPE, SPME technikák, szuperkritikus fluid extrakció. Ioncsere. Megoszlási egyensúlyok befolyásolása komplexképzőkkel.
5. Kromatográfia. Alapvető összefüggések.
6. Folyadékkromatográfia. Normál- és fordított fázisú technikák. Módszerfejlesztés, optimalizálás. Analitikai-, félpreparatív- és preparatív technikák. Ionkromatográfia. Méretkizárásos kromatográfia. HPLC. UPLC. HPLC-MS technikák.
7. Detektálási lehetőségek a folyadékkromatográfiában. UV, RI, ELS, EC, fluoreszcenciás-, forgatóképességi-, vezetőképességi detektorok.
8. Gázkromatográfia. Detektálási lehetőségek. GC-MS technikák.
9. Planáris kromatográfia. TLC, HPTLC, papírkromatográfia.
10. Kapilláris elektroforézis.
11. Az elválasztás-technika szerepe a radioizotóppal jelzett gyógyszer-molekulák előállításában.
12. Radioaktivitás detektorok.
13. Elválasztástechnikai módszerek validálása.

Ajánlott irodalom:

1. Dr. Balla József: A gázkromatográfia analitikai alkalmazásai, Abigél Bt., Budapest, 1997, vagy Edison House kft, Dabas, 2007
2. Dr. Fekete Jenő: A folyadékkromatográfia elmélete és gyakorlata, Edison House Kft., Dabas, 2007
3. Dr. Mádi Istvánné (szerk.): Elválasztástechnika, egyetemi jegyzet, Tankönyvkiadó, Budapest, 1985
4. Dr. Kovácsné Dr. Hadady Katalin: Hagyományos és modern rétegrendszerű folyadékkromatográfia, egyetemi jegyzet, Egyetemi Kiadó, Debrecen, 1995
5. Handbook of Radioactivity Analysis. by M. E L'Annunziata, Ed. Academic Press (Harcourt), London, UK. 1998

DOZIMETRIA, SUGÁRVÉDELEM

Tantárgyfelelős: Varga József

A tárgy oktatója: Varga József, Csepura György, Nagy Annamária

Óraszám/hét: 2 (szeminárium)

Kreditszám: 3

Számonkérés módja: kollokvium

Tematika: (a kurzus célja, rövid tematikája)

A tantárgy célja a sugárzás biológia hatásainak, a sugárvédelem elveinek, eszközeinek és módszereinek megismertetése.

1. Sugárzás és anyag kölcsönhatása. Sugárzás detektálása. Dózisfogalmak. A dozimetria eszközei.
2. A lakossági sugárterhelés összetevői. Az ionizáló sugárzás biológiai hatásai. Sugárkárosodás megjelenési formái. Általános sugárbaeset-elhárítási ismeretek. Külső sugárforrások elleni védekezés.
3. Dóziskorlátok rendszere. Sugárveszélyes munka személyi és tárgyi feltételei.
4. Nyilvántartási feladatok. Hatósági felügyelet, ellenőrzések. Izotóplaboratóriumok osztályozása. Sugárvédelem nyílt radioaktív készítmények használatakor.
5. Radioaktív hulladékok kezelése. Dekontaminálás.

Kötelező irodalom:

Varga J. (Szerk.) Biológiai izotóptechnika. DE EFK, 2006.

Ajánlott irodalom:

Köteles Gy.: Sugáregészségtan. Medicina, 2002.

J. Magill, J. Galy: Radioactivity · Radionuclides · Radiation. Springer, 2005.

NUKLEÁRIS ANALITIKAI MÓDSZEREK A KÖRNYEZETKUTATÁSBAN

Tantárgyfelelős: Dr. Palcsu László

A tárgy oktatói: Dr. Molnár Mihály, Dr. Uzonyi Imre, Dr. Csige István, Dr. Palcsu László, Dr. Kertész Zsófia.

Óraszám: kéthetente 2 óra elmélet, kéthetente 2 óra gyakorlat

Kreditszám: 4

Számonkérés módja:

1. *Aeroszolk eredete és terjedése*
Légköri aeroszol: definíció, keletkezés, kémiai összetétel, tulajdonságok, hatások (klimatikus, környezeti és egészségügyi). Aeroszol vizsgálati módszerek – nukleáris analitikai módszerek: ionnyaláb analitika és PIXE (részecske indukált röntgen emisszió). Aeroszol eredetének meghatározása elemösszetétel és méreteloszlás alapján. Statisztikai modellek alkalmazása az aeroszol források feltérképezésére.
2. *Természetes háttérsugárzás, radondozimetria*
Radonizotópok a környezetben, keletkezésük, transzportjuk a geo-, hidro- és az atmoszférában. Légköri áramlási és keveredési folyamatok nyomjelzése a természetes eredetű radonnal. A radon és rövidéletű bomlástermékeinek mérésére szolgáló módszerek.
3. *Izotópanalitikai módszerek a hidrológiában*
Környezeti izotópok. Stabil vízigotópok ($^{18}\text{O}/^{16}\text{O}$ és $2\text{H}/1\text{H}$) szerepe a vízbázisok kutatásában. Beszivárgási hőmérséklet, keveredés, eredet. Vizek kora és beszivárgási hőmérséklete vízben oldott nemesgázok alapján. Vízben oldott szulfát eredete a $^{34}\text{S}/^{32}\text{S}$ izotóparány alapján. Vízben oldott nitrát, ammónia eredete a $^{15}\text{N}/^{14}\text{N}$ izotóparány alapján. Átlagos tartózkodási idők meghatározása radioaktív környezeti izotópok segítségével. Vízterek veszélyeztetettségének, túlermelésének vizsgálata.
4. *Természetes radioaktív izotópok szerepe a környezetkutatásban*
Csillagászati korok mérése izotópos módszerekkel (a szupernova robbanás és a szilárd anyag megjelenés között eltelt idő mérése, meteoritok besugárzási korának mérése, meteoritok Földre érkezése óta eltelt idő mérése). Földtani kormeghatározási módszerek ($\text{U}/\text{Th}/\text{Pb}$ -, K/Ar -, Ar/Ar -, Rb/Sr -, Sm/Nd -, Lu/Hf -, Re/Os -, U/He -, U/Th - és a hasadvány-nyom módszer). Talajrétegek és karbonátos kiválások korának mérése (termolumineszcens kormeghatározás; radiokarbon módszer). Vizek kormeghatározása (C-14 , H-3 , Freon, SF_6 , Kr-85 , Ar-39 mérése alapján). Régészeti kormeghatározás (bio)fizikai módszerekkel (radiokarbon, dendrokronológia, elemösszetétel-mérésen alapuló kormeghatározási technikák történelmi műtárgyak estén). Globális (radio)markerek felhasználása a kormérésre (Bomba- ^{14}C és ^{-3}H , Csernobili- ^{137}Cs , stb.).
5. *Röntgenfluoreszcencia analízis a környezetkutatásban*
A röntgenemissziós analitika (irodalomban: X-ray Fluorescence Analysis /XRF/) fizikai alapjai: elektromágneses színeképtartomány, atommodellek, karakterisztikus röntgensugárzás keletkezése, fluoreszcencia hozamok és más alapvető paraméterek, röntgensugárzás kölcsönhatása anyaggal.
6. Kvantitatív röntgenemissziós analitika elméleti alapjai, mátrix-effektus, enhancement, a mátrix-effektus csökkentésén, kompenzálásán és „matematikai eljárások”-on alapuló elemösszetétel meghatározási módszerek.
7. Mérési elrendezések és analitikai műszerek: karakterisztikus röntgensugárzás gerjesztése és detektálása, radioaktív izotópok, röntgensövek, energia-diszperzív és hullámhossz-diszperzív spektrométerek, laboratóriumi XRF berendezések, minta előkészítési eljárások, standardok, kalibráció, AXIL és más analitikai szoftverek, spektrumkiértékelés, koncentráció-meghatározás, adatközlés.
8. Társterületek: röntgen-diffrakció, elektron és nukleáris mikroszondák, fókuszált röntgen és szinkrotron sugárzáson alapuló korszerű mikroanalitikai eljárások.
9. XRF analitika alkalmazása a környezetkutatásban: ásványi anyagok, folyami és tengeri üledékek, légköri aeroszolk, talajok, folyóvizek, ivóvizek, biológiai anyagok (növények, állati szövetek) elemi összetételének (nehézfémtartalmának) vizsgálata.

Ajánlott irodalom:

1. Ozima and Podosek: Noble Gas Geochemistry, Cambridge University Press
2. Fritz and Clark: Environmental Isotopes in Hydrogeology, Lewis Publishers

RADIOAKTÍV JELZETT VEGYÜLETEK AZ ORVOSBIOLÓGIÁBAN

Tantárgyfelelős: Kertész István

Oktató: Kertész István, Környei József, Szabó András

Óraszám: 2 ó/hét

Kredit: 3

Számonkérés módja: kollokvium (szóbeli vizsga)

Tematika: Az előadás célja az orvosi biológiai gyakorlatban felhasznált különböző izotópos jelölési technikák ismertetése.

1. A nukleofil szubsztitúció – alifás és aromás. Reakciómechanizmus. Az elektrofil addíció. A leggyakrabban alkalmazott PET radiológyszer, a ^{18}F -FDG szintézisének történelmi fejlődése.
2. A PET-ben használt radiojelzett vegyületek orvosi alkalmazásának területei és a leggyakrabban használt vegyületek. Általános megfontolások a ^{18}F jelölés-kémiában. A ^{18}F jelölés „igáslova”
3. Új fejlesztések és trendek a ^{18}F jelölésben. (Enzimatis jelölés, ionos folyadékok alkalmazása, radiofluórozás protikus oldószerben, Huisgen cikloaddició. A C-F kötés lehetséges alternatívái: Si-F, B-F, P-F kötések kialakításai.)
4. ^{11}C jelölés. A két fő prekursor – a metán és a széndioxid. A legfontosabb jelzett vegyületek és előállításuk. Új technológiák bevezetése (mikrofluid reaktor, mikrohullámú aktiválás, szilárd fázison történő reakció stb.).
5. Pd katalizált C-C kötés (Stille, Suzuki reakció), metil transzfer reagensek. A szénmonoxid és a hidrogén cianid felhasználása ^{11}C -gyel történő jelölési reakciókban.
6. Radioaktív jódizotópok jellemzése és alkalmazási lehetőségeik a klinikumban és az orvosi biológiai kutatásokban.
7. Radiojódozási reakciók: elektrofil addíció telítetlen kötésre, aromás elektrofil szubsztitúció, nukleofil és rézionok jelenlétében történő radiojódozás.
8. Radiojódozott vegyületek előállítása és alkalmazása: o-jód-hippurát, norchloesterol, MIBG, zsírsavak, amfetamin, IBZM, iomazenil, α -metil-metil-tirozin, humán szérum albumin, fibrinogén, antitestek immunoszcintigráfiára és radioimmun-terápiára.
9. Átmenetifém komplexek előállítása és alkalmazása: Cr-51, Mo-99/Tc-99m, W-188/Re-188. A molibdén-technécium és wolfram-rénium generátor.
10. A Tc-99m-komplexek előállítása és alkalmazása. Kismolekulák, peptidek és antitestek, diszperz rendszerek.
11. Másodfajú fém radionuklidok komplexei és alkalmazásuk: Ga-67, In-111, Tl-201
12. Terápiás felhasználású β -sugárzó fémkomplexek.
13. ^{14}C jelölési technikák
14. ^3H jelölési technikák

Ajánlott irodalom:

Hans-Jurgen Wester (szerk.): Molecular Imaging Handbook Series Volume 1, Pharmaceutical Radiochemistry (I)

RADIOAKTÍV GYÓGYSZEREK ELŐÁLLÍTÁSA ÉS MINŐSÉGELLENŐRZÉSE

Tantárgyfelelős: Dr. Józai István

Oktatók: Dr. Józai István, Szikra Dezső, Pótári Norbert, Miklovicz Tünde

Óraszám/hét: 2

kredit:2

Számonkérés módja: gyakorlati jegy

A tantárgy célja:

A PET radiógyógyszerek előállításának és minőségellenőrzésének gyakorlati bemutatása.

Tematika:

1. Sugárszennyezett felületek dekontaminálása. [^{18}F]FDG radiofarmakon előállítása: a gyártó panel és vegyszerek előkészítése, a szintézis végrehajtása, a kész farmakon steril ampullákba való dozírozása
2. A [^{11}C]Metionin előállítása: a gyártó panel és vegyszerek előkészítése, a szintézis végrehajtása, a kész farmakon steril ampullákba való dozírozása
3. Egyébb ^{11}C illetve ^{18}F radionukliddal jelölt vegyületek előállítása
4. A [^{18}F]FDG radiofarmakon minőségellenőrzése: a gyógyszer hatóanyagának, radiokémiai- és kémiai tisztaságának meghatározása HPLC és TLC eljárások alkalmazásával.
5. A [^{11}C]Metionin minőségellenőrzése: a radiógyógyszer hatóanyagának, radiokémiai-, kémiai- és enantiomer tisztaságának meghatározása HPLC módszerrel.
6. A PET radiofarmakonok minőségellenőrzése során alkalmazott HPLC módszerek validálása. A validálási paraméterek meghatározása: linearitás, ismételhetőség, specifikusság.
7. A [^{18}F]FDG és a [^{11}C]Metionin radionuklidos tisztaságának meghatározása gamma spektrometrián. A ^{18}F és a ^{11}C izotóp azonosítása a fotocsúcs energiája és a felezési idő alapján.

Ajánlott irodalom:

1. A Nukleáris Medicina Fizikai, Kémiai Alapjai-Környei József –Kossuth Egyetemi kiadó-1997
2. Folyadékkromatográfia-Dr. Fekete Jenő-Jáva Kft. -2003.
3. Kremmer Tibor, Torkos Kornél, Szókán Gyula: Elválasztástechnikai módszerek elmélete és gyakorlata, Eötvös Kiadó 2005.

ÉLETTANI FOLYAMATOK VIZSGÁLATA IZOTÓPOS MÓDSZEREKKEL

Tantárgyfelelős: Dr. Márián Teréz

Oktatók: Dr. Márián Teréz, Dr. Trencsényi György

Óraszám/hét: 2

Kredit: 3

Számonkérés módja: kollokvium

Az előadás keretében foglalkoznak a normál és patológiás anyagcsere folyamatok (glukóz anyagcsere, fehérje szintézis, kolin anyagcsere stb), illetve a sejtekben, szövetekben zajló fiziológiás és patofiziológiás folyamatok (hipoxia, sejtproliferáció, stb.) nyomon követésével izotópos módszerek felhasználásával. Az előadás részét képezik a receptor – ligand kötődések vizsgálata is. Az előadások bemutatják a fenti folyamatok vizsgálatához szükséges eszközöket

és módszereket, úgymint az *in vitro* akkumulációs méréseket, az autoradiográfiát „egész test metsző” segítségével, az *in vivo* biodisztribúciós és MiniPET vizsgálatokat, ezek előkészítését, legfontosabb lépéseit, valamint az eredmények értékelésének módjait. Bemutatásra kerülnek a legfontosabb és a diagnosztikában, kutatásban leggyakrabban használt radiofarmakonok.

Tematika:

1. Normál és patológiás (daganatok, gyulladásos folyamatok, hipoxia, stb.) szénhidrát anyagcsere jellemzése, vizsgálatának lehetőségei PET radiofarmakonokkal.
2. Glükózanyagcsere vizsgálata, mérési lehetőségei ^{18}F FDG radiofarmakonnal.
3. Normál és patológiás aminosav anyagcsere jellemzése, vizsgálatának lehetőségei ^{11}C -metioninnal.
4. Lipidanyagcsere vizsgálata PET radiofarmakonnal (^{11}C -kolin) egészséges és patológiás szövetekben.
5. PET radiofarmakonokkal végzett *in vitro* és *in vivo* vizsgálatok módszerei a preklinikai, kísérletes onkológiai gyakorlatban.
6. PET radiofarmakonok a gyógyszerkutatásban.
7. Receptor – ligand kötések vizsgálata PET technikával.

Ajánlott irodalom:

1. „Nukleáris Medicina” elektronikus tankönyv szerkesztője Varga József (<http://www.nmc.dote.hu/nmtk> , 2007 és 2008)
2. A nukleáris medicina tankönyve Szerk.: Szilvási István 2002

RADIOKÉMIAI ALAPMÉRÉSEK

Tantárgyfelelős: Nagy Noémi

A tárgy oktatója: Nemes Zoltán

Óraszám/hét: 1

Kreditszám: 1

Számonkérés módja: gyakorlati jegy

A kurzus részletes tematikája (heti bontásban, 4 órás gyakorlatokra tömbösítve):

1. Gázionizációs detektor alapvető funkcióinak megismerése, mérési paraméterek beállítása
2. Gamma-spektrometria
3. Izotóphígításos analízis
4. Radiometrikus titrálás
5. Rövid és hosszú életű radioaktív izotóp felezési idejének meghatározása
6. Béta-sugárzás visszaszóródásának mérése
7. Béta-sugárzás önabszorpciójának mérése

Ajánlott irodalom:

Kónya József, Nagy Noémi, Nemes Zoltán: Magkémia gyakorlatok (Debreceni Egyetem)

Vegyész MSc diplomamunka (a jelentkezés és tárgyfelvétel előírásai)

1. A diplomamunka lehetséges témaköre és tantervi elhelyezése:

A diplomamunka értéke **30 kredit**, amely az előfeltételek megléte esetén **15-15 kredit** bontásban a képzés **3. és 4. félévében** teljesítendő. A diplomamunka II. (TKML0002) tárgy felvételének **előfeltétele** a diplomamunka I. (TKML0001) teljesítése.

Mivel a képzés specializációját nem a diplomamunka témája, hanem a felvett kurzusok határozzák meg, ezért diplomamunka bármely a Kémiai Intézet által jóváhagyott témában elkészíthető.

2. A jelentkezés és felvétel szabályai:

A szükséges feltételek fennállása esetén a diplomamunka a Kémiai Intézet bármely tanszékén készíthető, tudományos fokozattal rendelkező témavezető irányítása mellett. Azonos elvek szerint a diplomamunka külső munkahelyeken is készíthető, de a DE OEC és AMTC kémiai és/vagy biokémiai tanszékeinek kivételével ilyenkor egy belső konzulens kijelölése is szükséges.

A jelentkezés a képzés 2. félévében egy eredményesen lezárt félév után lehetséges. A jelentkezés elfogadásáról a Kémiai Intézet Tanácsa dönt célszerűen április (keresztféléves képzés esetén november) hónap elejéig.

A „diplomamunka” tárgy felvétele a képzés 3. félévétől esedékes, ha a hallgató addig igazolni tudja az alábbi feltételek teljesítését:

- A diplomamunka felvételét megelőzően legalább **55 kreditnek** megfelelően teljesítette tanulmányi kötelezettségeit
- Az 55 krediből legalább **30 kreditet** a szakmai törzsanyag alapján teljesített. (A szakmai törzsanyag összesen 48 kreditnek felel meg, amelyből a mintatanterv szerint 38 kredit teljesítése javasolt a képzés első két félévében).

Az idegen nyelvi követelmények teljesítésének feltételei

A mesterfokozat megszerzéséhez államilag elismert legalább **középfokú C típusú**, illetve azzal egyenértékű nyelvvizsga letétele szükséges bármely olyan élő idegen nyelvből, amelyen a szakmának nemzetközileg használt tudományos szakirodalma van (angol, német, francia, orosz, olasz, spanyol).

Az angol szakmai nyelv fejlesztésének céljából a választható szakmai tárgyak egy részét **angol nyelven** lehet teljesíteni a választható tárgyak kreditpontjainak terhére **maximum 8 kreditponton** belül. Ezen tárgyak köre tartalmazhatja a „Professional communication in English (Szakmai nyelvhasználat angol nyelven)” című tárgyat, továbbá az angolnyelvű gyógyszerész- és vegyész-képzésben meghirdetett tárgyakat, az Idegennyelvi Lektorátussal egyeztetett szakmai-nyelvi tárgyakat és bármely más, angol nyelven (is) meghirdetett szabadon választható szakmai tárgyat.

Testnevelési követelmények

A Debreceni Egyetem mesterképzésben (MSc, MA) résztvevő hallgatóinak egy féléven keresztül heti két óra testnevelési foglalkozáson való részvétel kötelező. A testnevelési követelmények teljesítése a végbizonyítvány (abszolutórium) kiállításának feltétele.

Záróvizsga

A záróvizsga célja:

A végzős hallgató szakmai ismereteinek ellenőrzése, különös tekintettel az ismeretek alkalmazásában nyújtott képességeire. A záróvizsgán a végzős hallgatónak bizonyítania kell, hogy képes a magas szintű szakmai feladatok önálló ellátására és a felmerülő problémák gyors és reális kezelésére. A záróvizsgán ugyancsak számot kell adnia előadó és vitakészségéről valamint alapos tárgyi ismereteiről.

A záróvizsgára bocsátás feltételei:

Záróvizsgára csak az a hallgató bocsátható, aki a Vegyész mesterképzési szak tantervében előírt valamennyi tanulmányi köztelezettségének eleget tett, beleértve a minimum 120 kredit teljesítését, illetve ezen krediteknek az egyes szakmacsoportokon belüli megoszlását is. Több mint 120 kredit teljesítése nem jelent felmentést semmilyen előírt tárgy/képzési forma (pl. elmélet/gyakorlat arány) követelményeinek teljesítése alól. További feltétel, hogy a hallgató témavezetői útmutatásokkal, de önálló munkára alapozva készítse el a diplomamunkáját és azt minimum 3 héttel a záróvizsga megkezdése előtt juttassa el a kari tanulmányi osztályhoz.

A záróvizsga lebonyolítása:

A záróvizsga két részből áll: i) a diplomamunka nyilvános bemutatása és megvédése és ii) szóbeli szakmai vizsga a Záróvizsga Bizottság jelenlétében, előre rögzített tételek alapján.

A diplomamunka max. 35-45 oldal terjedelmű önálló kémiai kutatási probléma megoldását bemutató alkotás. A diplomamunka témaválasztása a képzés 2. félévében aktuális és a témaválasztást az Intézet Oktatási Bizottsága hagyja jóvá.

A diplomamunka formai követelményeit az „*Útmutató a projektmunka/szakedolgozat/diplomamunka készítéséhez*” rögzíti, melyet a jelöltek a Kémiai Intézet honlapjáról letölthetnek. A diplomamunka elektronikus feltöltésére, a Tanulmányi Osztályon való beadására és a vizsgabizottsághoz való eljuttatására vonatkozó eljárási rendet a mindenkori Tanulmányi és Vizsgaszabályzat rögzíti.

A diplomamunkát független bíráló értékeli, akinek személyét az Intézet Oktatási Bizottsága hagyja jóvá. A bíráló a munka minősítésére is javaslatot tesz, de a záróvizsgát elégtelen minősítési javaslat esetén is el kell kezdeni. A diplomamunka bemutatása és védeése nyilvános Intézeti ülésen történik, melyet a szakmai záróvizsgától elkülönült időpontban kell megrendezni. Az ülésen a jelölt max. 10 percben ismerteti munkájának főbb eredményeit, majd válaszol a bírálatban megfogalmazott kérdésekre/megjegyzésekre. A bírálónak feladata, hogy a munkához kapcsolódóan kérdéseket tegyen fel, amelyek akár a hiányosságok/tévedések korrekcióját, akár a témával összefüggő általánosabb felvetéseket is jelenthetik. A vita további részében az ülés valamennyi résztvevője tehet fel kérdéseket. A bemutatás és véde értékelése az ülésszak végén történik. A diplomamunka és a véde érdemjegyét a ZVB állapítja meg.

2. A szakmai záróvizsga:

A végzős hallgatók szakmai ismereteinek ellenőrzése a vizsgabizottság tagjainak jelenlétében lezajló szóbeli vizsgán történik. A vizsga zárt, de a Vizsgabizottság Elnökének előzetes engedélye alapján megfigyelőként bárki megjelenhet.

A számonkérendő ismereteket 5 témakörbe csoportosítjuk:

A – témakör: szervetlen, analitikai és fizikai kémiai ismeretek, szerves, bio- és alkalmazott kémiai ismeretek

- B – témakör: specializációjú analitikai kémiai ismeretek
C – témakör: specializációjú szintetikus kémiai ismeretek
D – témakör: specializációjú radiokémiai ismeretek

Az egyes témakörök tételes listáját az Intézet Oktatási Bizottsága állítja össze, és a listának a hallgatók számára az Interneten keresztül legalább 3 hónappal a vizsga megkezdése előtt hozzáférhetőnek kell lenni. Fontos, hogy az egyes tételek ne a korábbi alapképzési programok ismereteinek újrakérdezését jelentsék, hanem a magasabb szintű ismereteknek egy olyan komplex számonkérését, amely természetesen több ponton támaszkodik a korábbi ismeretekre is.

A vizsgán minden hallgató 2 tételt húz, specializációjának megfelelően az alábbi módon összeállított témakörökből:

specializáció nélküli képzés esetén: 2 tétel az A témakörökből

analitikus specializáció esetén: 1-1 tétel az A és B témakörökből

szintetikus specializáció esetén: 1-1 tétel az A és C témakörökből

radiokémikus specializáció esetén: 1-1 tétel az A és D témakörökből

A vizsgán a jelölt mindkét témában 10-15 percben ad számot tudásáról, amelynek eredményét a vizsgabizottság zárt ülésen értékeli.

Az oklevél minősítése

A Debreceni Egyetem Tanulmányi- és Vizsgaszabályzata alapján az oklevél minősítése:

kiváló	4,81 – 5,00
jeles	4,51 – 4,80
jó	3,51 – 4,50
közepes	2,51 – 3,50
megfelelt	2,00 – 2,50

Diploma minősítése:

Az oklevél minősítése az alábbi részjegyek figyelembevételével történik:

- a tanulmányok egészére számított (halmozott) súlyozott tanulmányi átlag;
 - a szakdolgozat bírálati jegy és a védés alapján a záróvizsga bizottság által adott jegy,
 - a záróvizsgán szerzett jegy
- számtani átlaga.

Záróvizsga tételek vegyész MSc szakon

A- tantárgycsoport

(szervetlen, analitikai, fizikai, kolloid és radiokémia, szerves, bio- és műszaki kémia, valamint szerkezetvizsgáló módszerek törzsanyag)

1. Az elemorganikus vegyületek definíciója, csoportosítási lehetőségei. A főcsoportbeli elemorganikusok főbb típusai, kötésviszonyaik, előállítási lehetőségeik. Magnézium- és lítiumorganikus reagensek gyakorlati alkalmazási lehetőségei. Izoprényártás Al-organikus katalízissel. Szilikonpolimerek.
2. Az átmenetifém-organikus vegyületek általános jellemzése. Az átmenetifém-alkil, -karbonil, -alkén, valamint a η^4 - η^8 kötés módú komplexek legfontosabb képviselői. Ipari folyamatok fémorganikus katalízissel: (kereszt)kapcsolási reakciók Pd-alkilokkal; a Monsanto-eljárás; alkének hidroformilezése; oxovegyületek szintézise Pd-alkénekkel (Wacker-eljárás); homogén fázisú hidrogénezés.
3. A biológiai rendszerek elemi összetétele és az elemek csoportosítása élettani hatásuk szerint. A létfontosságú elemek biológiai szerepe. A biológiailag fontos ligandumok (aminosavak, peptidek, fehérjék, nukleinsavak, porfirinvas vegyületek) komplexképző sajátosságai, metalloproteinek és metalloenzimek tulajdonságai. Az alkálifémek és alkáliföldfémek szerepe biológiai rendszerekben. Kationmegoszlás, transzportfolyamatok.
4. Az oxigénmolekula tárolása, szállítása és aktiválása. A vas és a réz biológiai szerepének csoportosítása, részvételük a biológiai oxidációs folyamatokban. A cink biológiai szerepe, fontosabb cinktartalmú enzimek. Az egyéb nyomelemek (molibdén, mangán, kobalt, vanádium, szilícium, króm, szelén, stb.) biológiai szerepe. A bioszervetlen kémiai ismeretek gyógyászati és környezetvédelmi alkalmazásai.
5. Az izotópia speciális területei, az izotópeffektusok termodinamikája, magreakciók, a nukleáris energiatermelés és környezetvédelmi kérdései.
6. A határfelület fogalma. Adszorpció oldatokból, a töltött felület kialakulása és szerkezete, elektromos kettősréteg. Az elektród folyamatok kinetikája, a csereáramsűrűség fogalma, a Butler–Volmer-egyenlet és gyakorlati alkalmazása. Elektrokémiai áramforrások: primer és szekunder elemek, tüzelőanyag elemek.
7. A fluid határfelületek. Laplace-nyomás, kapilláris jelenségek. Biológiai és biokompatibilis határfelületek. Biológiai folyamatok fizikai kémia leírása és értelmezése, az élő szervezet termodinamikája és szabályozási jelenségeinek vizsgálata. Enzimkinetika.
8. Kémiai dinamikai jelenségek és termodinamikai hátterük: multistabilitás, oszcilláció, káosz; nyílt rendszerek, a minimális entrópiaprodukciónak elve és az általános evolúciós kritérium.
9. Funkciós csoportok hatékony kialakításának módszerei, funkciós csoportok interkonverziója, oxidatív és redukzív átalakítások. Szintionok fogalma, típusaik. Retroszintézis elve, szerves molekulák retroszintetikus analízise. A legfontosabb diszkonnekciók bemutatása (példákkal).
10. Védőcsoportok, védőcsoport osztályok bemutatása. Alkoholok, fenolok és diolok védelmére alkalmas védőcsoportok, alapvető védési és hasítási technikái. Amino, karbonil és karboxil csoport védelmére alkalmas védőcsoportok, alapvető védési és hasítási technikák.

11. C–C kötés (egyszeres és többszörös) kialakítása: Sav és bázis katalizált reakciók. Enolátok és rokon vegyületek szintetikus alkalmazása. Fémorganikus reagensek és átmenetifém-katalizált kapcsolási reakciók alkalmazása.

12. Heterociklusos vegyületek csoportosítása és nevezéktanuk. Három- és négytagú, egy heteroatomot tartalmazó heterociklusok előállítása és reakcióik. π -elektronfeleslegű és elektronhiányos aromás heterociklusok jellemzése. Öttagú több heteroatomot tartalmazó vegyületek. Hattagú, több heteroatomot tartalmazó vegyületek. Héttagú heterociklusos vegyületek.

13. Az atomspektroszkópiai módszerek: atomemissziós módszerek (ICP-AES), atomabszorpciós módszerek (grafitkemencés AAS), ICP-MS. Elvi alapok és gyakorlati alkalmazások. Lehetséges zavaróhatások. Háttérkorrekciós technikák.

14. Elektrokémiai módszerek az analitikai kémiában, a módszerek elve, megvalósítása és alkalmazási lehetőségei. Elektrogravimetria, coulometria. A polarográfia alapjai, eszközei. Polarográfiás módszerek. Inverz voltammetria. Ciklikus voltammetria. Bipotenciometria. Karl Fisher titrálás bipotenciometriás meghatározással.

15. A kromatográfiás módszerek elvi alapja és összehasonlító jellemzésük. A kromatográfiás módszerek megvalósítása és alkalmazási lehetőségei. Ioncserés kromatográfia. Ionkromatográfia. Szuperkritikus fluid kromatográfia. Szuperkritikus fluid extrakció.

16. Az elektroforetikus módszerek elvi alapja és összehasonlító jellemzésük. Az elektroforetikus módszerek megvalósítása és alkalmazási lehetőségei. Gélelektroforézis és alkalmazási területei. Detektálás gélben. Kapilláris elektroforézis és módszerei. Elektroozmózis.

17. A tömegspektrometria elvi alapjai és alkalmazásai. A különböző kísérleti technikák összehasonlítása a teljesítőképesség és alkalmazhatóság szempontjából. Szervetlen kémiai alkalmazásokhoz használható ionforrások és analizátorok. Fragmentációs folyamatok és szabályszerűségeik.

18. Az NMR spektroszkópia elvi alapjai és alkalmazási területei. Rezonanciafeltétel, kémiai eltolódás, magspin-magspin csatolás, elsőrendű spektrumanalízis (gyenge csatolási szabályok). Spektrális paraméterek (^1H és ^{13}C eltolódások, magspin-magspin csatolások) molekulaszervezeti alkalmazásai.

19. A kvantumkémiai számítások elméleti alapjai, a különböző közelítő módszerek jellemzői és korlátai, az egyes módszerekkel nyerhető információk. A számításokhoz használható szoftverek, molekulaszervezet, reakciómechanizmus és termodinamikai számítások példákkal bemutatva.

20. A felületek modern vizsgálati módszerei, nanotechnológiai alapok, a kolloidika biológiai alkalmazásai.

21. Mérlegegyenletek. Áramok. Differenciális mérleg. A transzportelmélet, az általános transzportegyenlet – a műszaki folyamatok rendszerezésének alapja.

22. Hővezetés és diffúzió. Hőcsere áramló folyadékban. Egyensúlyi összefüggések, fázisegyensúly, egyensúlyi görbe, munkavonal.

23. A kémiai reaktorok csoportosítása, működésüket befolyásoló főbb tényezők, matematikai leírásuk. Gyakorlatban használt reaktorok és kiválasztásuk szempontjai.

24. A kőolaj és földgáz összetétele. A kőolaj és földgáz előkészítése. A kőolaj-finomítás két fontos lépése: az atmoszférikus és vákuumdesztilláció, és ezek termékei. A motorhajtó

anyagok (motorbenzin, kerozin, Diesel-gázolaj) és a velük szemben támasztott követelmények.

25. A kőolaj-feldolgozás petrokémiai eljárásai: termikus krakkolás (és változatai a késleltetett koksizálás és viszkozitástörés); katalitikus krakkolás, hidrokrakkolás, katalitikus benzinreformálás.

26. Műanyagok. A legnagyobb mennyiségben felhasznált műanyagok: polietilén, polipropilén, poli(vinil-klorid), polisztirol, polietilén-tereftalát, poliuretán. Tulajdonságaik (mechanikai tulajdonságok, hőállóság, vegyszerállóság) és alkalmazásaik.

27. Bioreguláció molekuláris szinten. Fehérje konformáció és szabályzás összefüggése az oxigént tároló és szállító molekulák példáján keresztül. Szabályozás az enzimek szintjén. Az enzimaktivitás szabályozás lehetséges formáinak (allostéria, kovalens módosítás, limitált proteolitikus hasítás, kompartmentalizáció-izoenzimek, szabályozó fehérjék) enzim példákon keresztül történő bemutatása.

28. Idegrendszeri szabályozás: hormonok és receptorok. G-fehérjékkel kapcsolt receptorok szignál útvonala. Foszfatidil inozitol jelátviteli kaszkád és az inzulin aktiválta jelpálya. Génexpresszió szabályozása a transzkripció szintjén a prokariótákban (a lac operon kettős szabályozása) és az eukariótákban (transzkripciós faktorok és hisztonok szerepe)

B- tantárgycsoport: (analitikai kémiai specializáció)

1. A kémiai analízis lépései. A mintavétel fontossága a kémiai analízisban. Mintavételi eljárások megtervezése, statisztikai szempontok. Gázok, folyadékok, szilárd anyagok mintavételi eljárásai. A minta tárolása, tartósítása.

2. Szerves és szervetlen minták előkészítése kvantitatív és kvalitatív analitikai kémiai vizsgálatokra: Szervetlen és szerves anyagok mintaelőkészítési eljárásai. Atmoszférikus és nagynyomású roncsolás. Feltárások módszerei. Kjeldahl-roncsolás. Soxhlet-extraktor. SPE, SPME, elődúsítás, automatizált mintakezelés.

3. Kémiai szenzorok jellemzése, csoportosítása: elektrokémiai és félvezető szenzorok, bioszenzorok, optódák. Csillapított teljes reflexió spektrometria (ATR). Felületi plazmon rezonancia spektrometria (SPR). Jelöléses analitikai módszerek főbb típusai: komponensek jelölésének típusai (ELISA).

4. Folyamatos analízis, kinetikai analitikai kémiai módszerek. Buborékszegmentált folyamatos analizátor, FIA, áramlási profilok és értelmezésük, eszközök, on-line mintaelőkészítés, automatikus analízis.

5. Modern folyadékkromatográfiás módszerek. Ioncserés kromatográfia, ionkromatográfia, szuperkritikus fluid kromatográfia, szuperkritikus fluid extrakció.

6. Az elektroforetikus módszerek és legfontosabb alkalmazásaik. Gélelektroforézis és alkalmazási területei. Detektálás gélen. Kapilláris elektroforézis. Az elektroforetikus módszerek csoportosítási lehetőségei. Elektrooszmózis. Lab-on-a-chip.

7. Optikai forgatóképesség és cirkuláris dikroizmus. Gyakorlati alkalmazásuk. Elektromágneses sugárzás és anyag kölcsönhatása. Polarizált fény, cirkuláris kettőtörés és cirkuláris dikroizmus jelensége, optikai aktivitás, ORD és CD spektrumok, CD spektroszkópia alkalmazási lehetőségei abszolút konfiguráció meghatározására.

8. Atomspektroszkópiai módszerek. Az atomabszorpció és -emisszió elvi alapjai, eszközei és gyakorlati alkalmazásai. Atomemissziós módszerek. ICP-AES. Lézerablációs mintabevitel.

ICP-MS. Atomabszorpciós módszerek. Grafitkemencés AAS. Háttérkorrekciós technikák. Lehetséges zavaróhatások.

9. A tömegspektrometria elvi alapjai és alkalmazásai. Fontosabb ionizációs módszerek, analizátorok. A különböző kísérleti technikák összehasonlítása a teljesítőképesség és alkalmazhatóság szempontjából. Kapcsolt technikák: GC-MS, LC-MS, ICP-MS, CE-MS, tandem MS módszerek.

10. Mágneses magrezonancia (NMR) spektroszkópia: alapjelenségek és molekulaszervezeti alkalmazások. Rezonanciafeltétel, kémiai eltolódás, magspin-magspin csatolás, elsőrendű spektrumanalízis (gyenge csatolási szabályok). Spektrális paraméterek (^1H és ^{13}C eltolódások, magspin-magspin csatolások) molekulaszervezeti alkalmazásai. T1, T2 relaxáció, Bloch-egyenlet, a dinamikus NMR alapjai.

11. Elektrokémiai módszerek I.: Eszközök és az egyes módszerek főbb alkalmazási területei. Elektrogravimetria. Coulometria. Bipotenciometria. Karl Fisher titrálás bipotenciometriás meghatározással.

12. Elektrokémiai módszerek II.: polarográfiás és egyéb voltammetriás módszerek. Eszközök és az egyes módszerek főbb alkalmazási területei. A polarográfia alapjai, eszközei. Polarográfiás módszerek. Tast-polarográfia. Inverz voltammetria. Ciklikus voltammetria.

13. Termikus analízis. Eszközök, módszerek és fontosabb alkalmazási területeik. TG, DTG, DTA, DSC. A derivatográf. Termometriás titrálások.

14. Az analitikai kémiai mérési eredmények kiértékelése, statisztikai elemzése. A kemometria analitikai kémiai alkalmazásai. Standard addíció módszere, belső standard módszer. Mérési hibák. F-próba, egymintás- és kétmintás t-próba alkalmazása, várhatóérték konfidencia intervallumának számítása. Variancia analízis alkalmazási lehetőségei mérési eredmények kiértékelésénél és kísérletek tervezésénél. Lineáris regresszió alapjai. Becslés a legkisebb négyzetek módszerével. Többváltozós statisztikai módszerek, diszkriminancia analízis, főkomponens analízis és cluster analízis alapjai, és felhasználási lehetőségei.

15. Az analitikai kémiai mérések minőségbiztosítása, akkreditáció. A minőségügy története. Az analitikai kémiai mérések minőségbiztosítása, akkreditáció, a minőségirányítási kézikönyv felépítése. Az ISO szabványrendszer, a TQM alkalmazása. Az analitika minőségbiztosításának jellemzői. Validálás, teljesítményjellemzők. A GLP, GMP alapelvei, követelményei. Az MSZ EN ISO/IEC 17025:2005 szabvány.

C-tantárgycsoport (szintetikus kémiai specializáció)

1. A kémiai reakciók perturbációelméleti leírása. Sztereoelektron effektusok és megnyilvánulásai. Periciklusos reakciók fogalma, típusai, szintetikus jelentősége, az értelmezésükre alkalmazott módszerek áttekintése és összevetése.

2. Szabad gyökök előállítása, szén-központú gyökök stabilitási viszonyai, reakcióik, az ezeket befolyásoló tényezők. Gyökreakciók szintetikus alkalmazása, gyökös és ionos reakciók összehasonlítása.

3. Kinetikus aszimmetriás transzformációk fogalma és típusai. A legfontosabb királis kiindulási anyagok jellemzése („chiral pool”), szintetikus alkalmazásuk enantiomertiszta célvegyületek előállítására. Szubsztrát-, segédanyag-, reagens- és katalizátor-kontrollált aszimmetriás szintézisek, alapelvük és példák.

4. Kinetikus és dinamikus kinetikus rezolválás. Többszörös sztereodifferenciálás. Legfontosabb aszimmetriás átalakítások (alkilezés, aldol-reakciók, oxidációk és redukciók, organokatalízis).
5. Farmakológiai alapfogalmak, farmakokinetika és farmakodinámia. Gyógyszerhatások molekuláris alapjai, targetek, receptorális és nemreceptorális gyógyszerhatás. Agonizmus, antagonizmus. Az autonóm idegrendszer, a szív és érrendszer, a gyulladás farmakológiája. Központi idegrendszerre ható szerek.
6. Parallel szintézisek, vegyületeknyvtárak. Oldat- és szilárdfázisú szintézismódszerek, előnyeik és hátrányaik. Gyantán kötött szubsztátok, reagensek és segédanyagok. Robotizált szintézisek.
7. Mikrohullámú aktiválás elmélete és alkalmazása. Mikrohullámmal aktivált oldat- és oldószermentes reakciók. Berendezések, alkalmazási technikák szerves kémiai szintézisekben. Az áramlásos kémia alapjai és alkalmazási lehetőségei.
8. Korszerű 1D és 2D NMR módszerek a szerves vegyületek szerkezetének meghatározásában, szelektív TOCSY, szelektív NOE, Watergate, COSY, TOCSY, NOESY, ROESY, HSQC, HMBC.
9. A kationos és anionos polimerizáció kinetikája és mechanizmusa. Az elő ionos polimerizáció gyakorlati alkalmazásai.
10. A gyökös polimerizáció kinetikája és mechanizmusa (szabad gyökös, NMP és ATRP). Az élőgyökös polimerizáció gyakorlati alkalmazásai.
11. Gázkromatográfok, kolonnatípusok, injektorok és detektorok. Kromatográfias paraméterek meghatározása. Mennyiségi és minőségi analízis, GC-MS.
12. Folyadékromatográfok, HPLC, GPC technikák. Kolonnatípusok, kolonna-technológia. Állófázisok kiválasztása. Izokratikus- és gradiens módszerek. Királis vegyületek elválasztása. Kromatográfias paraméterek meghatározása.
13. A tömegspektrometria ionforrásai, tömeganalizátorok, detektorok. MALDI-TOF MS módszer alapjai és alkalmazásai: szintetikus és természetes polimerek móltömegének, móltömegeloszlásának, funkcionalitásának meghatározása.
14. Elektroporlasztásos ionizálási módszerek (ESI, APCI, APPI). Online (LC, GPC)-ESI MS. MALDI MS/MS és ESI-MS/MS (PSD, CID) módszerek és alkalmazásuk peptidek, oligoszacharidok és kis molekulatömegű vegyületek szerkezetének meghatározására.

D-tantárgycsoport (radiokémikus specializáció)

1. Stabilis és radioaktív izotópok. A radioaktív bomlás típusai, a bomlás kinetikáját leíró törvények.
2. Töltött részecskék, elektromágneses sugárzás és neutronok kölcsönhatása az anyaggal. A sugárzás és az anyag kölcsönhatásán alapuló analitikai módszerek csoportosítása a belépő és kilépő részecskék, ill. elektromágneses sugárzások alapján.
3. Természetes radioaktív izotópok, ill. izotóparányok analitikai alkalmazásai földtörténeti, történeti korok meghatározásában és geológiai folyamatok vizsgálatában.

- 4.** Radioaktív nyomjelzés alapelvei. A nyomjelző kiválasztásának szempontjai. A radioaktív nyomjelzés alkalmazása a fizikában, az analitikai és a szerves kémiában. Nyomjelzés ipari méretekben.
- 5.** A nukleáris energiatermelés: az alapvető magreakciók, az atomerőmű elvi működése. Az atomenergia-termeléssel és a radioaktív hulladékkezeléssel kapcsolatos kémiai ismeretek.
- 6.** Nukleáris létesítmények környezeti hatásai. Nukleáris környezetellenőrzési eljárások: levegő-, talaj-, vízellenőrzési módszerek. A részecskegyorsítókra alapozott izotóp-előállítások és diagnosztikai vizsgálatok környezetvédelmi szempontjai.
- 7.** Neutronforrások, részecskegyorsítók és izotópgenerátorok szerepe a radioaktív izotópok termelésében. Neutronhiányos és neutrontöbblettel rendelkező izotópok előállítása.
- 8.** Kromatográfiai módszerek a radiógyógyszerek gyártásában és a minőségellenőrzésében. A folyadék-, gáz- és planáris kromatográfia elvi alapjai és alkalmazási lehetőségeik a radioaktív izotóppal jelzett vegyületek kifejlesztésében és rutin jellegű gyártásában. A HPLC, UPLC, HPLC-MS, GC, GC-MS, TLC, papírkromatográfia elve és gyakorlata. A kromatográfiai módszerek validálása, az analitikai berendezések kvalifikálása.
- 9.** A leggyakoribb statikus planáris gamma-kamerás vizsgálatok elvi alapjai, a radiofarmakonok, leképező eszközök.
- 10.** A SPECT leképezés technikája és leggyakoribb alkalmazásai (szívizom-perfúzió, agy). A hibrid leképezés jelentősége.
- 11.** A dinamikus izotópdiagnosztikai eljárások: a gastrointestinalis rendszer és a vesék funkcióinak izotópvizsgálatai. A vese-clearance mérése.
- 12.** A "klasszikus" PET izotópok előállítása. A legelterjedtebb PET radiofarmakonok és minőségellenőrzésük.
- 13.** A PET-CT-vel végzett vizsgálatok szerepe az onkológiában és a receptorkutatásban.
- 14.** Izotópterápiás radiofarmakonok és alkalmazásuk elvei.
- 15.** Az ionizáló sugárzás biológiai hatásai, a sugárkárosodás megjelenési formái. A sugárveszélyes munka személyi és tárgyi feltételei, a dóziskorlátok. Sugárvédelem a nyílt radioaktív készítmények használatakor. A dóziszfogalmak, a dozimetria eszközei.