

Tartalomjegyzék

Előszó	2
A Vegyész mesterszak (MSc) képzési és kimeneti követelményei	3
A Vegyész mesterképzési szakra történő jelentkezés feltételei	7
A Vegyész mesterképzési szak intézményi felelősei	8
Szakirányválasztás a Vegyész mesterszakon	8
A Vegyész mesterképzési szak (MSc) tantervének szerkezete (1. táblázat)	10
A Vegyész mesterképzési szak (MSc) tantervi szerkezetének értelmezése	11
A Vegyész mesterszak tantervi hálói	13
I. Nappali tagozat	13
2. Táblázat: Természettudományos alapismeretek (BSc + MSc összesen 31 kredit):	13
3. Táblázat: Szakmai törzsanyag (kötelező 43 kredit):	14
4. Táblázat: Szabadon választható szakmai tárgyak (max. 35 kredit)	16
5. táblázat: Az analitikus vegyész szakirány kötelező és választható tárgyai (30 kredit)	17
6. táblázat: A szintetikus vegyész szakirány kötelező és választható tárgyai (30 kredit)	18
II. Levelező tagozat	19
A tanterv összeállításánál alkalmazott alapelvek:	19
7. táblázat: A levelező vegyész MSc képzés tantervi hálója féléves bontásban	20
Tantárgyi programok	22
1. Természettudományos alapismeretek	22
2. Szakmai törzsanyag	25
3. Szabadon választható szakmai tárgyak	36
4. Analitikus vegyész szakirány	55
5. Szintetikus vegyész szakirány	64
Vegyész MSc diplomamunka	74
1. A diplomamunka lehetséges témaköre és tantervi elhelyezése:	74
2. A jelentkezés és felvétel szabályai:	74
Az idegen nyelvi követelmények teljesítésének feltételei	74
Testnevelési követelmények	75
Zárávizsga	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 fejezik be először az alapképzési szakok hallgatói tanulmányaikat. Ezzel párhuzamosan szeptemberben beindulnak a mesterképzési vagy MSc kurzusok, melyek közül ez a kiadvány a Vegyész mesterszak 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 majd messzemenő segítséget biztosítani.

A Vegyész mesterképzést úgy terveztük meg, hogy az minél szélesebb körű ismeretekkel ruházza fel a végzettséget megszerzőket. Ez teszi lehetővé, hogy a végzett hallgatók a gyakorlati élet legkülönbözőbb területein megállhassák helyüket, beleértve az ipar, különös tekintettel a vegyipar nyújtotta elhelyezkedési lehetőségekre, valamint a különböző minőségellenőrzési, minőségbiztosítási és kutató-fejlesztő laboratóriumokban adódó feladatok színvonalas megoldására. 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 saját példájukból tudják, hogy a tudást nem adják ingyen, azért keményen és kitartóan kell dolgozni. Ebben a munkában a kémikus és más szakmabeli oktatók, illetve egyéb dolgozók a partnereik lesznek, együttműködésükre számíthatnak. Bízunk benne, hogy ennek az együttes munkának a gyümölcse egy keresett, jó elhelyezkedési lehetőségeket biztosító diploma, illetve 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 2008-ban elnyert **Chemistry EuroMaster** minősítés.

A Vegyész mesterszak tantervét a tapasztalatok és visszajelzések alapján folyamatosan igyekszünk majd korrigálni, finomítani és természetesen fejleszteni. Várjuk ezért kérdéseiket, megjegyzéseiket és javító szándékú javaslataikat. Felsőfokú tanulmányaikhoz sok sikert kívánunk.

Debrecen, 2010. május

Dr. Juhász László s. k.
egyetemi adjunktus
A DE TTK Kémiai Intézete
oktatási felelőse

Dr. Sóvágó Imre s.k.
egyetemi tanár
szakfelelős

A Vegyész mesterszak (MSc) képzési és kimeneti követelményei

1. A mesterképzési szak megnevezése: vegyész (Chemistry)

2. A mesterképzési szakon szerezhető végzettségi szint és a szakképzettség oklevélben szereplő megjelölése:

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

3. Képzési terület: természettudomány

4. A mesterképzésbe történő belépésnél előzményként elfogadott szakok:

4.1. Teljes kreditérték beszámításával vehetők figyelembe: szakiránytól függetlenül a kémia alapképzési szak, vegyészmérnök alapképzési szak, valamint az 1993. évi LXXX. törvény szerinti főiskolai szintű vegyészmérnöki, vegyész-fizikus laboratóriumi operátor, kémia tanári alapképzési szakok.

4.2. A bemenethez a 11. pontban meghatározott kreditek teljesítésével elsősorban számításba vehető alapképzési szakok: a biológia, a fizika, a földrajz, a földtudományi, a környezettan, a matematika, a természetismeret, valamint a biomérnök, az anyagmérnök, a környezetmérnök és az orvosi laboratóriumi és képalkotó diagnosztikai analitikus alapképzési szak.

4.3. A 11. pontban meghatározott kreditek teljesítésével vehetők figyelembe: azok az alap- vagy mesterfokozatot adó szakok, illetve a felsőoktatásról szóló 1993. évi LXXX. törvény szerinti főiskolai vagy egyetemi szintű alapképzési szakok, amelyeket a kredit megállapításának alapjául szolgáló ismeretek összevetése alapján a felsőoktatási intézmény kreditátviteli bizottsága elfogad.

5. A képzési idő félévekben: 4 félév.

6. A mesterfokozat megszerzéséhez összegyűjtendő kreditek száma: 120 kredit.

6.1. Az alapoató 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 mesterképzési szak 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 munkaköröket 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
- analitikus vegyész szakirányon 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 szakirányon szerzett ismeretek birtokában: adott szerves vegyipari vagy gyógyszeripari munkahelyen a hatékony, innovatív munkához szükséges speciális ismeretek rövid idő alatt történő megszerzésére és felhasználására.

c) A szakképzettség gyakorlásához szükséges személyes adottságok és készségek:

- kreativitás, rugalmasság,
- jó kommunikációs készség,
- problémafelismerő és - megoldó készség,
- intuíció és módszeresség,
- tanulási készség és jó memória,
- széles műveltség,
- környezettel szembeni érzékenység,
- elkötelezettség és igény a minőségi munkára,
- a szakmai továbbképzéshez szükséges pozitív hozzáállás,
- kezdeményező, döntéshozatali képesség, személyes felelősségvállalás,
- alkalmasság az együttműködésre, a csoportmunkában való részvételre, kellő gyakorlat után vezetői feladatok ellátására.

8. A mesterfokozat és a szakképzettség szempontjából meghatározó ismeretkörök:

8.1. Az alapképzésben megszerzett ismereteket tovább bővítő, mesterfokozathoz szükséges alapoó 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. A komplex vegyületek jellemzése, vizsgálatuk módszerei. Biológiai és gyakorlati szempontból jelentős ligandumok. A komplex vegyületek szerepe biológiai folyamatokban, gyógyászati, környezetvédelmi, analitikai, stb. jelentőségük. Az 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 fél-szintetikus 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 is elemző kurzusok. 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, minta-előkészítési 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) szakirány választása nélkül: A b) pontban felsorolt szakirányok ismeretköreiből egyenként legalább 4 kredit értékű ismeret teljesítése.

b) szakirány választása esetén:

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

Diplomamunka: 30 kredit.

9. 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.

10. Idegennyelvi követelmények:

A mesterfokozat megszerzéséhez bármely olyan élő idegen nyelvből, amelyen az adott szakmának tudományos szakirodalma van, államilag elismert középfokú (B2) komplex típusú nyelvvizsga vagy ezzel egyenértékű érettségi bizonyítvány vagy oklevél szükséges.

11. A mesterképzésbe való felvétel feltételei:

A hallgatónak a kredit megállapítása alapjául szolgáló ismeretek – felsőoktatási törvényben meghatározott – összevetése alapján elismerhető legyen legalább 70 kredit a korábbi tanulmányai szerint az alábbi ismeretkörökben:

Természettudományos ismeretek (15 kredit): matematika, fizika, informatika; biológia, földtudomány, környezettan

Gazdasági és humán ismeretek (5 kredit): EU ismeretek, általános gazdasági és menedzsment ismeretek, minőségbiztosítás

Szakmai ismeretek (50 kredit): általános kémiai, szervetlen kémiai, szerves kémiai, analitikai kémiai, fizikai kémiai, műszaki kémiai. A mesterképzésbe való felvétel feltétele, hogy a felsorolt ismeretkörökben legalább 40 kredittel rendelkezzen a hallgató. A hiányzó krediteket a mesterfokozat megszerzésére irányuló képzéssel párhuzamosan, a felvételtől számított két féléven belül, a felsőoktatási intézmény tanulmányi és vizsgaszabályzatában meghatározottak szerint meg kell szerezni.

Testnevelés: 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.

A Vegyész mesterképzési szakra történő jelentkezés feltételei

- *Előfeltételek nélkül figyelembe vehető alapképzési szakok:*

Kémia alapképzési szak (Kémia BSc)

Vegyésszmérnök alapképzési szak (Vegyésszmérnök BSc.)

A felvételnek – a sikeres felvételi vizsgán túlmenően – nincs egyéb, előre meghatározott feltétele azokban az esetekben, amikor a jelentkező a MAB által akkreditált vagy az Eurobachelor fokozat kibocsátásával felruházott bármely felsőoktatási intézményben Kémia BSc vagy Vegyésszmérnök BSc végzettséget szerzett.

- *Előfeltételek alapján figyelembe vehető egyéb szakok:*

a/ A **hagyományos ötéves képzésben** szerzett szakirányú oklevél (pl. gyógyszerész, kémia tanár) és rokon területen szerzett **MSc fokozatok** (pl. környezettan, anyagmérnök, környezetmérnök, biomérnök illetve egyedi elbírálás alapján egyéb szakok)

b/ Biológus, környezettan, fizikus, anyagmérnök, környezetmérnök, orvosdiagnosztikai laboratóriumi analitikus, illetve ezekkel ekvivalensnek tekinthető **alapképzési szakok** (amelyeket a kredit megállapításának alapjául szolgáló ismeretek összevetése alapján a felsőoktatási intézmény kreditátviteli bizottsága elfogad).

A fentebb felsorolt esetekben a Vegyész MSc fokozat megszerzéséhez a jelöltnek legalább **70 kredit** olyan szakmai előképzettséget kell igazolnia, amely a szakirányú Kémia BSc képzésnek megfeleltethető.

Az előírt 70 kredit megoszlása a következő:

- **természettudományos ismeretek: 15 kredit**
- **gazdasági és humán ismeretek: 5 kredit**
- **szakmai (kémiai) ismeretek: 50 kredit**

A Vegyész MSc képzésbe a felvétel a fentieknek megfelelő **minimum 40 kredit** elismerése után már megtörténhet és a maradó 30 kreditet (a Kémiai Intézet Oktatási Bizottságának előírása szerint) a Vegyész mesterképzési szak szakmai szabadon választható tárgyainak terhére lehet teljesíteni.

A Vegyész mesterképzési szak intézményi felelősei

A Vegyész mesterképzés szakfelelőse: Dr. Sóvágó Imre, egyetemi tanár

A Vegyész mesterszak – analitikus vegyész szakirány szakfelelőse: Dr. Fábíán István, egyetemi tanár

A Vegyész mesterszak – szintetikus vegyész szakirány szakfelelőse: Dr. Patonay Tamás, egyetemi tanár

Szakirányválasztás a Vegyész mesterszakon

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

Vegyész mesterszak (általános képzettség, szakirány nélkül)

Vegyész mesterszak – analitikus vegyész szakirány

Vegyész mesterszak – szintetikus vegyész szakirány

A tehetség önálló kibontakoztatását, az egyéni érdeklődés speciális fejlesztését illetve egyedi igények kielégítését szolgálhatja a **Vegyész mesterszak** (általános képzettség, **szakirány nélkül**) képzettség megszerzése. Ez esetben a törzsanyagban foglalt szilárd kémiai ismeretek megszerzése mellett (43 kredit) viszonylag nagy arányban (max. 35 kredit) szabadon választhat egyéb, de a szakmához szorosan kapcsolódó kémiai és kisebb hányadban egyéb természettudományos tárgyakat a hallgató. 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 szakirányú** képzés során a szakirányt 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 alapkutató 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 szakirányú** 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 képzett 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 készsége szintre való fejlesztésére.

A szakirányú képzésre történő jelentkezés a képzés első félévében, november 30-ig esedékes, de a szakirányú tanulmányok elkezdése csak a második félévtől kezdődően, az első félév tanulmányi kötelezettségeinek teljesítése után lehetséges. Az egyes szakirányok beindításának feltétele továbbá a kellő számú jelentkező, amit az Intézet Oktatási Bizottsága az aktuális helyzet függvényében minimum 5-10 fő között állapít meg. Szakirányú képzés csak nappali tagozaton lehetséges.

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	10	
Kémiai informatika	4	
Bio-Geo	5	
Összes	31	6
<i>Szakmai törzsanyag</i>		
Ebből: szervetlen kémia		6
fizikai kémia		11
szerves kémia		10
analitikai kémia		10
műszaki kémia		6
Összes		43
<i>Differenciált szakmai ismeretek</i>		35
Ebből: szakirány		30
<i>Diplomamunka</i>		30
Összes		120

A Vegyész mesterképzési szak (MSc) tantervi szerkezetének értelmezése

A vegyész mesterképzésbe történő belépés számos különböző típusú alapképzettség után megvalósulhat, ezért a konkrét teljesítendő feladatok egyénileg különbözhetnek, de minden esetben egyezésben kell lenni az előző táblázatban bemutatott kreditfeltételekkel. Ezek részletes magyarázatát az alábbiakban adjuk meg.

1. Nem szakmai szabadon választható tárgyak:

A teljes képzési időtartamon belül **6 kredit** teljesítendő/ismerhető el, amelyek a gazdasági, jogi, filozófiai, esetleg egyéb természettudományos (nem kémiai) ismeretek elmélyítését/bővítését célozzák. A 6 kredit a képzési időn belül bármikor teljesíthető, de nem lehet olyan tárgy, amelyet a hallgató az alapképzési ciklusban már teljesített.

2. Természettudományos alapismeretek:

A vegyész mesterképzésbe belépő hallgatók természettudományos előképzettsége az alapképzési vagy egyéb diploma jellegétől függően igen változatos lehet. Az általános előírás ezért a BSc és MSc képzés együttes időtartama alatt megszerzendő kreditek összes számát és tantárgyak szerinti eloszlását rögzíti. Ennek megfelelően a Vegyész mesterszak végzettséget igazoló diploma kibocsátásához a hallgatónak a **BSc + MSc képzések teljes időtartama alatt minimum 31 kreditnek** megfelelő tanulmányokat kell igazolnia a következő megoszlásban: matematika (12), fizika (10), informatika (4) bio-geo ismeretek (5) kredit. Fontos megjegyzés, hogy valamely természettudományos tárgyból történt „túlképzés” (pl. 15 kredit matematika) nem pótolja egy másik természettudományos tárgynál mutatkozó hiányt. Az MSc képzés tantervi hálójában ezen 31 kredit teljesítésére csak **6 kredit** keretet biztosít. Feltételezhető ugyanis, hogy a felvételt nyert hallgató a természettudományos tárgyakban megfelelő előképzettséggel rendelkezik (Kémia BSc alapképzettség esetén ez minimum 25 teljesített kreditet jelent). Amennyiben a hallgató már a felvétel időpontjában megfelel a 31 kredit feltételnek, akkor az itt biztosított 6 kreditet a differenciált szakmai ismeretek bővítésére is fordíthatja. Ha a felvételt nyert hallgató kevesebb, mint 25 kredit természettudományos előképzettséggel rendelkezik, akkor a hiányzó krediteket a differenciált szakmai ismeretekre rendelkezésére álló 35 kredit terhére teljesítheti. A hiányzó tárgyakat célszerűen a Kémiai alapszak (BSc) tantervében meghirdetett tárgyakból lehet pótolni. Az MSc-ben biztosított 6 kredit teljesítése a következő fejezetben összesített tantárgyakból lehetséges (**2. táblázat**).

3. Szakmai törzsanyag:

A szakmai törzsanyag a színvonalas vegyész mesterképzés alapköve, ezért az itt előírt **43 kreditet** valamennyi felvételt nyert hallgatónak teljesítenie kell a mesterképzés időtartama alatt. A szakmai törzsanyag tantárgycsoportonkénti megoszlása is rögzített (lásd 1. táblázat), míg az egyes tantárgycsoportokon belül előírt tárgyakat a **3. táblázat** mutatja.

4. Differenciált szakmai ismeretek:

A differenciált szakmai ismeretek **maximum 35 kreditnek** megfelelő szabadon választható tárgyat jelentenek, amelyek az alábbi 3 célcsoport szerint teljesíthetők:

a/ **Szakmai szabadon választható tárgyak**, amelyek a szakirány nélküli mesterképzés céljait szolgálják. Ezen tárgyak listáját a **4. táblázat** mutatja. A tárgyak általában tanévenként egyszer (őszi vagy tavaszi félévben) kerülnek meghirdetésre, ezért a választható tárgyak felvételével kapcsolatban mindenkinek célszerű előzetes tervet készítenie. Az egyes tárgyak abban az esetben indulnak, ha a jelentkezők létszáma eléri a legalább **5 főt**. A tárgyak kiválasztása során fontos még figyelembe venni azon tantervi alapelvet, hogy a

képzés teljes időtartama alatt előírt összesen **120 kredit minimum 40 %-át (összesen 48 kredit) gyakorlati foglalkozások** felvételével kell teljesíteni. A diplomamunka készítéséhez rendelhető 30 kredit gyakorlati foglalkozásnak minősül.

b/ **Analitikus és szintetikus vegyész szakirányok:** A szakirányok tantervi követelményei **30 kreditnek** megfelelő szakirányú elméleti és gyakorlati foglalkozás felvételével teljesíthetők. Ezek tantervi hálóját az **5. illetve 6. táblázatok** mutatják az analitikus illetve szintetikus szakirány esetén. A szakirány 30 kreditnek megfelelő tárgyai a szabadon választható 35 kredit terhére teljesíthetők. A fennmaradó 5 kredit terhére bármilyen szakmai tárgy felvétele lehetséges.

c/ **Nem kémiai előképzettségből induló (nem Kémia vagy Vegyészmérnök alapszak) továbbtanulás** esetén a szakmai szabadon választható tárgyak 35 kredites kerete az előképzettségben mutatkozó hiányosságok pótlására használható. A szükséges pótlások listáját a felvétellel egyidőben állapítja meg az Intézet Oktatási Bizottsága és ennek mértéke nem haladhatja meg a 30 kreditet (lásd a jelentkezés feltételeinél). A pótlandó tárgyak a Kémia és/vagy Vegyészmérnök alapképzési programok megfelelő tárgyait jelentik és ezek teljesítése a mesterképzés első két félévében kötelező. A diplomamunka készítésére való jelentkezés csak a szükséges pótlások teljesítése után lehetséges. A választható tárgyak keretéből fennmaradó minimum 5 kredit terhére bármilyen szakmai tárgy felvétele lehetséges. A fentebb felsorolt elvekből az is következik, hogy a mesterképzés szakirányú képzési formáiba történő bekapcsolódás ezen utóbbi csoportba sorolható hallgatók esetén az államilag finanszírozott 120 kredit terhére nem teljesíthető.

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. 7 kredit fizika	3
Elméleti atom és molekulafizika	TFME0212	2K+0+0	min. 7 kredit fizika	3
Számítógépes kvantumkémia	TKBG0902	0+3G+0	min. 12 kredit matematika	2
Számítógépes képfeldolgozás	TKME0903	2K+0+0	min. 12 kredit matematika	3
Felületfizika	TFME0991	2K+0+0	min. 10 kredit fizika	3
Fém- és kerámiatan	TFME0992	2K+0+0	min. 10 kredit fizika	3

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

K: kollokvium G: gyakorlati jegy

A: aláírás

3. Táblázat: Szakmai törzsanyag (kötelező 43 kredit):

Tantárgy neve	Tantárgy kódja	Óraszám/félév				kredit
		I.	II.	III.	IV.	
Szervetlen kémia: 6 kredit						
Bioszervetlen kémia ^a	TKME0203	2K+0+0				3
Koordinációs kémia ^a	TKME0204	2K+0+0				3
Elemorganikus kémia ^a	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. ^d	TKME0402		2K+0+0			3
Haladó fizikai kémiai gyakorlat	TKML0403	0+0+6G				5
Szerves és biokémia: 10 kredit						
Szerves szintézisek I.	TKME0301	2K+0+0				3
Szerves szintézisek II. ^d	TKML0302		0+0+5G			4
Szerves szintézisek II. ^d	TKMG0302		0+1A+0			0
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 ^{b,d}	TKML0501			0+0+3G		2
Szerkezetvizsgáló módszerek gyakorlat ^{b,d}	TKML0502			0+0+3G		2
Környezetanalitika gyak. szervetlen ^{c,e}	TKBE0205		1K+0+0			1
Környezetanalitika gyak. szervetlen ^{c,e}	TKBL0202		0+0+4G			3
Környezetanalitika gyak. szerves ^c	TKML0504		0+0+4G			3
Környezetanalitika gyak. szerves ^c	TKME0504		1K+0+0			1
Műszaki kémia: 6 kredit						
A vegyészmérnöki tudomány alapjai	TKME0601		2K+0+0			3
Válogatott fejezetek a kémiai technológiából	TKME0602			2K+0+0		3
Diplomamunka: 30 kredit						
Diplomamunka I.	TKML0001			0+0+20		15
Diplomamunka II.	TKML0002			0+0+20		15

Megjegyzések:

^a A három tárgy közül egy kötelezően választandó

^b A két tárgy együtt választható

^c A két tárgy közül az egyik kötelezően választandó, ha az előző csoportból (^b) nem választott.

^dA kurzus felvételének a feltétele az azonos című kurzusok (vagy előző) kurzusok sikeres teljesítése.

A kötelező keret terhére nem választott tárgyak a választható tárgyak kreditjének terhére még teljesíthetők.

^eA tárgy BSc-ben is teljesíthető, azonban a BSc + MSc szinten csak egyszer.

4. Táblázat: Szabadon választható szakmai tárgyak (max. 35 kredit)

Tantárgy neve	Tantárgy kódja	Óraszám (E+S+G) számonkérés	Kredit
Matematikai módszerek a kémiában és a vegyészmérnöki tudományban	TKBE0904	2K+0+0	3
Kémia és társadalom	TKME0701	2K+0+0	3
Művelettani laborgy.	TKML0611	0+0+4G	3
Alkalmazott koord.kémia	TKME0211	2K+0+0	3
Makrociklusos ligandumok komplexei	TKME0212	2K+0+0	3
Különleges és veszélyes anyagok	TKBE0204	2K+0+0	3
Kémiai speciáció	TKME0214	2K+0+0	3
Komplexxémiai vizsgálómódszerek	TKML0215	0+0+4G	3
Biokolloidika	TKME0411	2K+0+0	3
Fényszórás fotometria	TKME0533	1K+0+0	1
Heterogén reakciók I.	TKME0412	2K+0+0	3
Heterogén reakciók II.	TKME0413	2K+0+0	3
A gyógyszergyártás minőségellenőrzése és analitikája	TKML0531	0+0+4G	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
Kémiai hullámok	TKME0419	2K+0+0	3
Komplekxkat. szerves szint.	TKME0420	2K+0+0	3
Környezeti kémia II.	TKME0421	2K+0+0	3
Korszerű IR módszer.	TKME0422	2K+0+0	3
Röntgendiffrakciós szerkezetvizsgálat	TKME0423	2K+0+0	3
Mikrohullámú kémia	TKME0424	4K+0+0	4
Bevezetés a nem-lináris 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
Kiroptikai spektroszkópia	TKME0333	2K+0+0	3
Enzimtechnológia	TKME0334	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

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

Tárgy neve	kódja	II. félév	III. félév	IV. félév	Kredit
Kötelező tárgyak					24
Analitikai kémia és szerkezetvizsgáló módszerek kötelező blokkjában szereplő, de az ott biztosított 10 kredit terhére nem teljesített további tárgyak					8
Kemometria I.	TKME0511	2K+0+0			3
Kemometria II.	TKME0512		2K+0+0		3
Analitikai minőségbiztosítás	TKME0513			2K+0+0	3
Mintavétel, mintaelőkészítés analitikai tesztek	TKML0514	0+0+4G			4
Mintavétel, mintaelőkészítés analitikai tesztek	TKME0514	1A+0+0			0
Környezeti tömegspektrometria	TKML0515			0+0+2G	3
Környezeti tömegspektrometria	TKME0515			1A+0+0	0
Választható tárgyak					6
Élelmiszeranalitika	TKME0521			2K+0+0	3
Nanotechnológia	TFME0990			2K+0+0	3
Radioanalitika	TKME0523			2K+0+0	3
Radioanalitika gyak.	TKML0523			0+0+3G	2
Atomabszorpció	TKBE0505			2K+0+0	3
ICP-OES-MS	TKME0525			2K+0+0	3
Réteggromatográfia	TKME0526			2K+0+0	3
Feladatcentrikus modern analitika	TKME0527			2K+0+0	3
Elektroforetikus módszerek	TKME0529			2K+0+0	3
NMR operátori gyakorlat	TKML0530			0+0+2G	2

6. táblázat: A szintetikus vegyész szakirány 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 tömegspektrometriás módszerek	TKME0316			2K+0+0	3
Nagy hatékonyságú szintézistechnikák	TKML0317			0+0+3G	3
Nagy hatékonyságú szintézistechnikák	TKMG0317			0+1A+0	0
2D NMR módszerek	TKML0318		0+0+2G		3
2D NMR módszerek	TKMG0318		0+2A+0		0
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
Természetes O-heterocikl.	TKME0325			2K+0+0	3

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 szakirányok**.

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

4. A nem szakirányú továbbtanulás esetén előírt **pótlások** (maximum 30 kredit lehet) a levelező **vegyésmérnök BSc képzés** tárgyait felvételével teljesíthetők.

5. A levelező vegyész MSc képzés választható tárgyait lehetőség szerint úgy kell meghirdetni, hogy arra az I. és II. évfolyam egyszerre jelentkezhesen (Valamennyi tárgy csak ősszel vagy tavasszal lenne meghirdetve).

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.

7. táblázat: A levelező vegyész MSc képzés tantervi hálója féléves bontásban

Tantárgy neve	Kódja	Konzultációs óraszám/ számonkérés	Kredit
I. félév			
Kötelező tárgyak			14
Bioszervetlen kémia	TKBE0203_L	8K	3
Elméleti fizikai kémia I.	TKME0401_L	8K	3
Haladó fizikai kémia labor. gyak.	TKML0403_L	24G	5
Szerves kémia szintézismódszerek	TKME0301_L	8K	3
Választható tárgyak köre (és/vagy pótlások)			16
Koordinációs kémia	TKME0204_L	8K	3
Elemorganikus kémia	TKME0205_L	8K	3
Különleges és veszélyes anyagok	TKBE0204_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
Kémia és társadalom	TKME0701_L	8K	3
Felületfizika	TFME0991_L	8K	3
Fém és kerámiatan	TFME0992_L	8K	3
Korszerű IR spektroszkópia	TKME0422_L	8K	3
Röntgendiffrakció	TKME0423_L	8K	3
Kiroptikai 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
Élő rendszerek fizikai kémiája	TKME0417_L	8K	3
Enzimtechnológia	TKME0334_L	8K	3
Kemometria I.	TKME0511_L	8K	3
Analitikai minőségbiztosítás	TKME0513_L	8K	3
Növényvédőszer kémia	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
Atomabszorpciós spektrometria	TKBE0505_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 röntgenspektroszkópiai módszerek, tömegspektroszkópiai eljárások; SIMS, SNMS, elektronspektroszkópiai 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. Giocavazzo 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. Molekulaszinképek.

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. Sztjepanov 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: Póta György

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.

SZÁMÍTÓGÉPES KÉPFELDOLGOZÁS

Tantárgyfelelős: Nagy István

A tárgy oktatója: Nagy István

Óraszám/hét: 2

Kreditszám: 3

Számonkérés módja: írásbeli vagy szóbeli kollokvium

Javasolt előtanulmány:

Tematika: (a kurzus célja, rövid tematikája)

A tárgy célja elsősorban áttekintő, és nem részletes ismeretek átadása a digitális képfeldolgozás speciális eszközszeréről és annak alkalmazásairól, részben kémiai példákkal. A látáselmélet alapjai. A számítógépes képfeldolgozás modellje. A képfeldolgozás sajátos eszközei. Digitális kép létrehozása és megjelenítése. Képjavítási eljárások. Foltkeresés, foltelelemzés, élkeresés. Képosztályozás, statisztikus és szintaktikus alakfelismerés, texturaelemzés. Optikai karakter-felismerés. A képfeldolgozás alkalmazása természettudományos és orvosi példakon keresztül: objektumszámlálás, ásványminták, korróziós jelenségek, pórusos anyagminták leírása és elemzése. térképészeti és űrtechnikai alkalmazások. diagnosztikai alkalmazások: patológiai minták interaktív analízise, DNA analízis. ultrahangfelvételek diagnosztikai elemzése. Ipari és vezérléstechnikai alkalmazások. A képfeldolgozás kriminalisztikai és haditechnikai aspektusai. Számonkérés: kollokvium. A tárgy felvétele ajánlott a Kémiai hullámok c. választható iránt érdeklődőknek illetve azoknak, akik azt már hallgatták.

Ajánlott irodalom:

Az előadások anyaga házijegyzet formában

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.

2. Szakmai törzsanyag

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 szervetlen 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 bioszervetlen 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 bioszervetlen kémia, Semmelweis Kiadó, Budapest, 2001.
3. E.I. Ochiai, General Principles of Biochemistry of the Elements, Plenum Press, New York, London (1987).

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 ligandumtér elmélet. A komplexek optikai és mágneses sajátosságai. 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)

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: Szervetlen 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 sajátságokat 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, Micskei Károly, 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.

ELMÉLET 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, entrópiaprodukció, kereszteffektusok, fizikai és kémiai alkalmazások, a struktúráképződés 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: Kathó Ágnes

A tárgy oktatója: Kathó Ágnes, 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. Fizikai kémiai laboratóriumi gyakorlatok (szerk.: Kathó Á.); Tankönyvkiadó, Budapest, 1988.
2. Bevezetés a fizikai kémiai mérésekbe (szerk.: Kaposi O.); Tankönyvkiadó, Budapest, 1988.
3. Tanszékcsoporti munkaközösség: Haladó Fizikai kémiai laboratóriumi gyakorlatok MSc hallgatóknak (tervezet)

SZERVES KÉMIAI SZINTÉZISMÓDSZEREK I.

Tantárgyfelelős: Patonay Tamás

A tárgy oktatója: Patonay Tamás

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.

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 KÉMIAI SZINTÉZISMÓDSZEREK II.

Tantárgyfelelős: Juhász László

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

Óraszám/hét: 0 + 1 + 5

Kreditszám: 4

Számonkérés módja: gyakorlati jegy

Javasolt periódus: 2

Javasolt előtanulmány: Szerves kémiai szintézismódszerek I. (Vegyész MSc)

Tematika: (a kurzus célja, rövid tematikája)

A tárgy célja a BSc képzés során szerzett szerves kémiai laboratóriumi műveletek elmélyítése, és új ismeretekkel, módszerekkel való kibővítése.

Reakciók szeptumtechnika és védőgáz használatával. Fémhidridek alkalmazása, transzfer hidrogénezés. Reakciók fémorganikus reagensek segítségével. Átmenetifém-katalizált kapcsolási reakciók. Cikloaddíciók, 1,3-dipoláris cikloaddíciók. Aszimmetrikus redukció és új C-C kötés kialakítása. Többlépéses szintézis védőcsoport alkalmazásával természetes vegyületeken. Irodalmazás, irodalom követés elektronikus adatbázisok alkalmazásával. Szerkezetmeghatározás és szintézistervezés.

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.
5. U.T. Bornscheuer, R.J. Kazlauskas, Hydrolases in organic synthesis, WILEY-WCH, Weinheim, 1999.

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 szabályozás 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:

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

MŰSZERES ANALITIKA

Tantárgyfelelős: Gáspár Attila

A tárgy oktatója: Gáspár Attila, Fábíán 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 színeképszerkezet (atom és ionszínképek) összefüggése. Korszerű gerjesztési módszerek az atomspektroszkópiában: egyenáramú és

nagyfrekvenciás (ICP) plazmák, lézergyújtás 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 szerves analitikai alkalmazásai: mágneses (Nier-féle), kettős fókuszállású (Herczog-féle) kvadrupól és repülési idő spektrométerek. Ionforrások (elektronbombázásos, kémiai ICP stb.) Molekula (abszorpciós) spektrofotometria és szerves analitikai 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 polarográfiai mérőmódszerek. Automatikus analízis: Flow Injection Analysis. Elválasztástechnika: modern planárokromatográfiai 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: Szilágyi László

A tárgy oktatója: Szilágyi László

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 spektroszkópiai 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. 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 ESR g-faktor. A g-faktor és a molekulaszervezet összefüggései. A mag-kvadrupólus-rezonancia (NQR) alapjai. Kvadrupólus-kölcsönhatások az NMR-spektrumokban. Az FT NMR módszer alapjai.

Elektron színeképek effektusainak értelmezése molekulaszervezeti sajátosságok alapján. Molekulák optikai paraméterei (optikai forgatás, cirkuláris dikroizmus) és sztereokémiája közötti összefüggések bemutatása. UV, CD és OR adatok közötti

összefüggések tárgyalása. Infravörös (IR) spektroszkópia: rezgési színeképek elmélete. Karakterisztikus kötési és csoport frekvenciákat befolyásoló tényezők. Sztereokémiai viszonyok megnyilvánulása a rezgési színeképekben.

Ionizációs módszerek a tömegspektrometriában. Fragmentációs folyamatok értelmezése. Ionstabilitás. Ionkémiai alapfogalmak. Ütközési folyamatok elmélete, gyakorlata. Szerkezeti problémák megoldása spektroszkópiai 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: Posta József, Fábíán 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: Szilágyi László

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 spektroszkópai módszerek alkalmazására a kémiai szerkezetmeghatározásban.

Tematika: Számolási gyakorlatok a Zeeman-kölcsönhatás, Boltzmann-eloszlás, kémiai árnyékolás, eltolódási skálák témaköréből. ^1H NMR példák egyszerű g yengén 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 molekulaszervezet, 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 szerkezetvizsgálati 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 vegyületcsoportok MS jellemzői, gyakorlatokon keresztül bemutatva.

Ajánlott irodalom:

1. Szilágyi László: “ ^1H NMR spektrumok”, Tankönyvkiadó, Budapest, 1979, és folyamatos utánnnyomások.
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 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) szervetlen 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

A KÖRNYEZETANALITIKA SZERVES KÉMIAI MÓDSZEREI

Tantárgyfelelős: Patonay Tamás

A tárgy oktatója: Kiss Attila

Óraszám/hét: 1+0+4 Periódus: 2. félév

Kreditszám: 4

Számonkérés módja: Gyakorlati jegy

Javasolt előtanulmány: Analitikai kémia II (B.Sc.)

Tematika: (a kurzus célja, rövid tematikája)

A hallgatók megismertetése a környezetben előforduló, különösen veszélyes szerves szennyezők kimutatására használt műszeres analitikai eljárások elvi alapjaival, a vonatkozó határértékekkel, a hazai, európai és amerikai törvényi szabályozással. Az elméleti képzéshez kapcsolódóan a műszeres analitikai mérés technikai eljárások gyakorlati alapjainak és speciális mintafeldolgozási módszereknek a bemutatása. Környezeti minták mérésének különböző módszerekkel történő elvégzése, az eredmények kiértékelése és diszkutálása.

Az előadás tartalma:

A legveszélyesebb környezetszennyező anyagok ismertetése, veszélyességük tárgyalása, a környezetben mérhető koncentrációtartományaik áttekintése. A nyomszennyezőkkel kapcsolatos különleges mintaelőkészítés, hagyományos és speciális dúsítási eljárások. A minták kezelése, tárolása, a mintával érintkező edényekkel, eszközökkel kapcsolatos kívánalmak. A dúsított minták további feldolgozása, clean-up eljárások. A munkavégzéssel kapcsolatos egészségvédelmi és környezetvédelmi szabályok.

Az analitikában használatos kromatográfias módszerek összefoglalása, különös tekintettel a gázkromatográfias és folyadékkromatográfias eljárásokra. A készülékek általános ismertetése, a megfelelő detektorok kiválasztásának tárgyalása. GC-MS, GC-MSⁿ, LC-ESI-MS és LC-MS-TOF módszerek alapjai, felhasználási lehetőségeik a környezeti analitikában. Speciális, nagy érzékenységű kapcsolt kromatográfias technikák.

A leggyakoribb környezeti szennyezőkre vonatkozó magyar, európai és amerikai előírások. A környezetvédelmi és analitikai információk keresése az internet segítségével.

A gyakorlat tartalma:

A különböző típusba tartozó nyomszennyezőkkel kapcsolatos különleges mintaelőkészítések, hagyományos és speciális előkezelési és dúsítási eljárások áttekintése mérési típusonként. A minták kezelésének, tárolásának a megismertetése, gyakorlati ismerkedés a mintával érintkező edények különleges felületkezelésének módszereivel, az eszközökkel kapcsolatos kívánalmak. Extrakciós eljárások használatának, a dúsított minták további feldolgozásának, és a clean-up eljárásoknak a megismertetése, gyakoroltatása. Teljes mintafeldolgozási és mérési gyakorlatok elvégzése GC-FID és HPLC-UV/VIS technikákkal és további módszerekkel. Környezeti minták előkészítése MS mérésekhez, a mérési adatok kiértékelése, keresés interneten hozzáférhető spektrumkönyvtárakban, ismeretlen szennyezők azonosítása.

Ajánlott irodalom:

1. Dinya Zoltán-Susster Gabriella-Kiss Attila-Papp Gábor-Bak István: Környezetszennyező szerves vegyületek analitikája (egyetemi jegyzet, Kossuth Egyetemi Kiadó, 2002)
2. Environmental Analysis, R. N. Reeve. John Wiley and Sons Ltd. 1994.
3. Dr. Kőmíves József, Környezeti Analitika, Műegyetemi kiadó 1997-98

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 folyadékban. Hőcsere áramló folyadékban. 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. Sinnot: 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-gázelegyekkel. Oxosztézis. Aromás vegyületek nitrálása. Aromás aminok nitrovegyületekből. Aromás vegyületek szulfonálása. Aromás vegyületek klórozása. Aromás vegyületek oxidálása. Friedel-Crafts-reakciók. Acilezés. Észteressítések. 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

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: TMBE0607 és TMBG0607 Matematika II. előadás és gyakorlat.

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 alapozó 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: Görbék, felületek, gradiens, divergencia, rotáció, Laplace-operátor, felületi és vonalintegrál, integrálredukciós tételek, görbevonaltú koordinátarendszerek. Alkalmazások a mechanikában, elektromosságban, áramlásban és a transzportfolyamatok területén. A komplex függvénytan elemei, 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.

Ajánlott irodalom:

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

KÉMIA ÉS TÁRSADALOM

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 emberi társadalom szerkezete. A gazdasági alap, a politikai és ideológiai felépítmény sajátosságai. A tudományok szerepe az ideológiai és a gazdasági szféra összekapcsolódásában. A tudomány termelőerővé válása, a tudományos-technikai forradalom jellegzetességei és jelentősége az emberi társadalomban. Filozófiai és történeti háttér. A technológia fejlődésének eredményei és problémái. A technológia és az emberi környezet. A technológiai fejlődés környezeti következményei. A technológia szabályozásának feltételei és lehetőségei. Anyagelméleti kérdések. A kémia, mint az anyagi világ szerkezetének, mozgásainak fejlődésének megismerésére irányuló emberi tevékenység. Az anyagi világ individuális és kollektív struktúráinak a rendszerezése és hierarchiája az élettelen, az élő világban és a társadalomban a kvarkoktól a metagalaxisig, a kolloidoktól a kultúrszféráig.

Az I. természet sajátosságai. A II. természet, mint az emberi társadalom kialakulásának feltétele és következménye. A kémiai és nukleáris energiák, azok felhasználása és szabályozhatósága. A szénről, mint széntárszereplőről. A szénvegyületek nagy száma és azok forrásai. Óriás molekulák a biokémiában. Az ember alkotta óriások: a polimerek. Az élő rendszerek szintézisének lehetőségei. A klónozás társadalmi következményei. A kémia a társadalom életkörülményeinek javításáért. Az élelmiszeripar fejlődése, adalékok, tartósítás, színezés, előre gyártott, módosított természetes ételek, mesterséges élelmiszerek tömeggyártása és azok következményei. A gyógyszerek és gyógyszergyártás, a gyógyszerek használatának következményei. A kémia a tisztaság érdekében. A hagyományos szappanok, természetes és mesterséges mosó és mosogatószer. Enzimatiszerek. Fertőtlenítőszer. A kozmetikai szerekről. Eszközünk védelme: korrózióvédelem. Védőbevonatok kialakítása, festékek gyártása. A kémia káros következményei és azok elhárítása. Vízszennyezés és víztisztítás. A levegőszennyezés forrásai, a szennyező anyagok típusai. A közlekedési eszközök fejlődése, a motorikus közlekedés társadalmi szempontú előnyei és káros következményei. A négy gén és egy gin: karcinogén, allergén, halucinogén anyagok és az alkohol, mint kémiai anyagok és azok társadalmi hatásai.

Ajánlott irodalom:

1. Rádi P.: Kísérlet a mozgásformák rendszerének korszerű leírására, Magyar Filozófiai Szemle. 1967. (369-406 o.)
2. Mészáros E.: Bevezetés a környezettudományba, Akadémiai Kiadó, Bp., 2004.

3. Egyed L. (szerk.): A változó világegyetem, Közgazdasági és Jogi Könyvkiadó, Bp., 1976.
4. Oktatási segédanyagok

MŰVELETTANI LABORATÓRIUMI GYAKORLATOK

Tantárgyfelelős: Nagy Miklós

A tárgy oktatója: Nemes Sándor, Nagy Miklós

Óraszám/hét: 0+0+4

Kreditszám: 3

Számonkérés módja: gyakorlati jegy

Javasolt előtanulmány: BSc Kémiai technológia I.-II.

Tematika: (a kurzus célja, rövid tematikája):

Kísérleti és számítási módszerek elsajátítása az alpműveletek köréből. Aprítás dezintegrátoron, görgőjáraton és golyósmalomban. Osztályozás, szitálás, szemcseméret-eloszlás felvétele. Szárítás. A száradás kinetikájának vizsgálata, nedvességtartalom meghatározása. Desztillálás. Desztillációs kísérletek gőzfűtéses Lampart desztillálóval (Lampart desztilláló üzemeltetése, oldószerrel szennyezett víz desztillációs tisztítása). Vízlágyítás (vízlágyítási kísérletek mészhígítás és foszfátos módszerrel, félüzemi készülékben és ioncserélő berendezésben). Rektifikálás.

Keverés. Mechanikus keverők teljesítményszükségletének meghatározása. Szűrés és szűrési típusok vizsgálata. Fluidizáció. Hőátvitel vizsgálata. Tartózkodási időeloszlás reaktorokban. Folyadék-folyadék extrakció. Extrakció (félüzemi méretű, ellenáramú folyadék-folyadék extraktor működtetése, olajeltávolítás vízből oldószerrel). Filmbepárlás lengőlapátos berendezéssel (vizes sóoldat illetve oldószer bepárlásának vizsgálata). Kísérletek töltetes és választott terű abszorberekkel (szén-dioxid elnyelése vízben). Szerkezeti anyagok. Műanyagismeret.

Ajánlott irodalom:

1. F. Patat – K. Kirchner, Praktikum der Technischen Chemie, 4. Auflage, Walter de Gruyter. Verlag, Berlin 1986. (F. Patat – K. Kirchner: Ipari kémiai praktikum, Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1971.)

ALKALMAZOTT KOORDINÁCIÓS KÉMIA

Tantárgyfelelős: Brücher Ernő

A tárgy oktatója: Brücher Ernő

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)

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

Hőtechnikai berendezések tisztítása, sajátoságaik javítása komplekképzőkkel. A kelátképző igandumok orvosi diagnosztikai és terápiás alkalmazásai. Toxikus nehézfémek élő szervezetből történő eltávolításának gyorsítása, létfontosságú elemek bevitelle komplekképző ligandumokkal. A biológiai hatás és a komplekképző 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 komplexképzők felfedezése, a ligandumok típusai. A ligandumok szelektivitása és a makrociklusos effektus. A makrociklushoz kapcsolt funkciócsoport szerepe a szelektivitásban és a komplexek stabilitásában. A makrociklusos gyűrűk kialakítására használt szintetikus eljárások. Funkcionalizált makrociklusok előállítása, az alkalmazott származékképzési reakciók. Koronaéterek, kriptandok és funkciócsoportokkal rendelkező makrociklusok komplexképző sajátosságai, a komplexek szerkezet. A komplexek kinetikai sajátosságai. A makrociklusos komplexképzők 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.

KÜLÖNLEGES ÉS VESZÉLYES 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 történelmében 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.

KÉMIAI SPECIÁCIÓ

Tantárgyfelelős: Gáspár Attila

A tárgy oktatója: Posta József és Gáspár Attila

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

Kreditszám: 3

Számonkérés módja: Kollokvium

Javasolt előtanulmány: Analitikai kémia II.

Tematika: (a kurzus célja, rövid tematikája)

A környezettudományok, a katalízis és a biokémia a rendszereikben előforduló fémek koncentrációján túlmenően azok oxidációs állapotának, a hordozó anyaghoz való kapcsolódásának, a fém kémiai környezetének megismerését is igénylik. Ennek meghatározására ma közvetlen és közvetett módszerek állnak rendelkezésre. A közvetlen speciációs módszerek előnyös tulajdonsága, hogy az információ direkt, a tényleges állapothoz tartozik. Hátránya, hogy analitikai mutatóiban elmarad a közvetett vagy kombinált módszerekétől. Ennek ellenére a direkt speciációs módszerek ismerete alapvető és egységes rendszert alkotnak és az elválasztáson alapuló módszerekkel. A tárgy célja: megismertetni a hallgatókkal a közvetlen speciációs módszerek alapjait és példákon keresztül bemutatni használhatóságukat, alkalmazásuk korlátait. Célunk az, hogy a hallgató a tanultak alapján képes legyen adott speciációs probléma megoldásánál a célravezető módszer kiválasztására. A tárgy szerkezete: Az előadásra kerülő anyag három kérdéskört fog át: Módszerek a fémek oxidációs állapotának meghatározása környezeti, biológiai mintákban és katalizátorokban. Módszerek a fémmel kötésben levő atomok típusának meghatározására. Módszerek a fém koordinációjának és térállásának jellemzésére. A tárgyalásra kerülő módszerek: Vibrációs Spektroszkópia (FTIR, RAMAN), Mágneses rezonancia spektroszkópia (^{27}Al , ^{95}Mo stb.), ESR, Mössbauer spektroszkópia, röntgendiffrakció, fotoelektron spektroszkópia (XPS, XANES, EXAFS).

Ajánlott irodalom:

1. Posta J.: Elemek kémiai formáinak vizsgálatára alkalmas kapcsolt mérés technikák, Zárai Gy (szerk.) Az elemanalízis modern módszerei, Akadémiai Kiadó, Bp., 2006. (551-601 o.)

2. R. Cornelis, J. Caruso, H. Crews, K. Heimann (Eds.): Handbook of Elemental Speciation, John Wiley and Sons, Weinheim, 2003.
3. L. Ebdon, L. Pitts, R. Cornelis, H. Crews, O. F. X. Donard, Ph. Quevauviller (Eds.): Trace Element Speciation for Environment, Food and Health, Cambridge, 2001.
4. Oktatási segédanyagok

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.

A GYÓGYSZERGYÁRTÁS MINŐSÉGELLENŐRZÉSE ÉS ANALITIKÁJA

Tantárgyfelelős: Elek Sándor

A tárgy oktatója: Nádasdi Levente, Bernáthné Orosz Éva, Czabarka Éva

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.

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)

FÉNYSZÓRÁS FOTOMETRIA

Tantárgyfelelős: Berka Márta

A tárgy oktatója: Berka Márta

Óraszám/hét: 1+0+2

Kreditszám: 2

Számonkérés módja: kollokvium

Tematika: (a kurzus célja, rövid tematikája)

A fényszórás elvi alapjai, a jelenség magyarázata. Rayleigh-szórás. Rayleigh-Debye szórás. Folyadékok szórása. Anizotrópia. Részecskeméret-analízis statikus fényszórás /SLS/ alapján. Mie szórás. Alapegyenletek. /Zimm, Berry, Debye/. Polidiszperz rendszerek szórásfüggvénye. Abszorbeáló részecskékfényszórása. A dinamikus fényszórás /DLS/. Spektrál analízis. Autokorrelációs függvény. DLS polidiszperz rendszerekben. Összehasonlítás a statikus fényszórás eredményeivel. Alkalmazások. Gyakorlat: Moltömeg eloszlás meghatározás polimer oldatban SLS-sel. Részecskeméret eloszlás meghatározása DLS-sel tipikus /szol, emulzió/ kolloid rendszerekben. Érdekességek.

Ajánlott irodalom:

1. Milton Kerker The Scattering of Light and other Electromagnetic Radiation, Academic Press, New York, 1969
2. Malcolm B. Huglin, Light Scattering from Polymer Solutions, Academic Press, London, 1972.
3. Bruce J. Berne and Robert Pecora: Dynamic Light Scattering with applications to Chemistry, Biology, and Physics, New York: Wiley, 1976.
4. Kenneth S. Schmitz : An Introduction to Dynamic Light Scattering by Makromolekules, San Diego, Academic Press, Inc., 1990.

HETEROGÉN REAKCIÓK I.

Tantárgyfelelős: Nagy Noémi

A tárgy oktatója: Nagy Noémi

Óraszám/hét: 2+0+0

Kreditszám: 3

Számonkérés módja: kollokvium

Tematika: (a kurzus célja, rövid tematikája)

A kurzus célja, hogy a hallgatók egy kurzus keretén belül megismerjék azokat a törvényszerűségeket, amelyek a heterogén reakciókra általánosan érvényesek. Tematika: Az előadás első része ismerteti a heterogén folyamatok fő csoportjait, a folyamatok lejátszódásakor lényeges általános törvényszerűségeket, állapotváltozókat (felület, határfelület jellemzése, ill. vizsgálómódszerei), a reakciók termodinamikáját és kinetikáját. A második rész konkrét gyakorlati rendszerek esetén tárgyalja a speciálisan heterogén reakciókra jellemző sajátosságokat. Ilyen rendszerek a heterogén izotópcsere-rendszerek, a szilárd ioncserélők, a talaj, a kontakt katalizátorok.

Ajánlott irodalom:

1. Berecz Endre: Fizikai kémia, Tankönyvkiadó, Budapest, 1980
2. P.W. Atkins: Fizikai kémia, Tankönyvkiadó, Budapest, 1992
3. Wolfram Ervin: Kolloidika, Tankönyvkiadó, Budapest, 1971
4. Szabó Zoltán: Kontakt katalízis, Akadémiai Kiadó, Budapest, 1966
5. B.C. Gates: Catalytic Chemistry, Wiley-Interscience Publication, 1992

HETEROGÉN REAKCIÓK II.

Tantárgyfelelős: M. Nagy Noémi

A tárgy oktatója: Kónya József

Óraszám/hét: 2+0+0

Kreditszám: 3

Számonkérés módja: kollokvium

Tematika: (a kurzus célja, rövid tematikája)

A kurzus célja, hogy a hallgatók megismerjék azokat a törvényszerűségeket, amelyek az elektrokémiai potenciál megváltozásával járó heterogén reakciókra általánosan érvényesek. Az előadás felvételének feltétele: a Heterogén reakciók I. kollégium hallgatása. A tárgy tematikája: Az elektrokémiai potenciál változásával jellemezhető heterogén reakciók. Elektród folyamatok egyensúlya. Pourbaix-diagramok. Elektrokémiai egyensúly membrán/vizes oldat rendszerekben: ioncserélő membránok, biológia membránok. Elektród folyamatok kinetikája, a kinetikát befolyásoló tényezők. Vizsgálatok forgó korong elektróddal. Fémek anódos oldódása. Elektrokémiai korrózió. Korrózió elleni védelem: konstrukciós, passzív, aktív és átmeneti védelem. Redoxifolyamatok talajokban.

Ajánlott irodalom:

1. Kiss László: Az elektrokémiai fémoldódás kinetikája, Akadémiai Kiadó, Budapest
2. J.O.M. Bockris, D.M. Drazic: Electrochemical Science, Taylor&Francis, Ltd. London.
3. J.W. West, Electrodeposition and Corrosion Processes, Nostrand Co. Ltd., 1965.

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 szakirány 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 mérő módszerei. 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: Horváthné Csajbók Éva

A tárgy oktatója: Horváthné Csajbók Éva

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 szakirányt 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 bűvarkodás fizikai kémiája
- Transzportjelenségek élő rendszerekben. Diffúzió. Ozmózis félígáteresztő hártán 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, kimosódás. Hidrofóbicitás, hidrofilitás, protein „folding”, micelláris rendszerek. Kismolekulák vagy ionok kötődése makromolekulákhoz: protonálódás, pufferekapacitás, kooperatív kötődés.
- Kémiai kinetika: elsőrendű reakciók: baktériumok osztódása, radioaktív kormeghatározási módszerek.
- Biokémiai katalízis: Michaelis-Menten (steady-state) kinetikai modell és korlátai (visszairányuló reakció, több köztermék, 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

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

KÉMIAI HULLÁMOK

Tantárgyfelelős: Nagy István

A tárgy oktatója: Nagy István

Óraszám/hét: 2+0+0

Kreditszám: 3

Számonkérés módja: írásbeli vagy szóbeli kollokvium

Javasolt előtanulmány:

Tematika: (a kurzus célja, rövid tematikája)

A kémiai hullámjelenségek kialakulása. Fő jellemzőik, típusaik, megjelenési formáik, általános jelentőségük. Reakciófrontok terjedésének áttekintése gázelegyekben. Az égés terjedéséről. Reakciófrontok oldatokban: autokatalitikus hullámok, terjedési sebesség és hullámprofil, hullámjelenségek gerjeszthető közegekben. Hullámszerkezetek a Belouszov-Zsabotyinszkij-reakcióban. Stacionárius térbeli szerkezetek. Strukturált szerkezetek keletkezése homogén oldatokból, Turing-instabilitás, kémiai, biológiai és orvosi példák. Konvektív jelenségekkel kapcsolatos térbeli struktúrák fizikai és kémiai rendszerekben. Kémiai hullámok vizsgálatára alkalmas reaktortípusok, kísérleti módszerek, koncentrációgradiensek terjedésének műszeres mérése. A hullámprofil szerkezetének

kvantitatív felderítésére szolgáló módszerek. Hőmérsékleti gradiensek mérése: termokróm jelenségek alkalmazása, infravörös képfeldolgozás. Egyéb mérhető sajátságok vizsgálata, mágneses rezonancia leképezés. Számonkérés: kollokvium, mely osztályzata igényes elméleti vagy gyakorlati (kísérletes) feladat önálló megoldásával is megszerezhető.

Ajánlott irodalom: Az előadások anyaga házijegyzet formában

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 „összintesség” 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

KORSZERŰ INFRAVÖRÖS SPEKTROSZKÓPIAI MÓDSZEREK

Tantárgyfelelős: Nagy István

A tárgy oktatója: Nagy István

Óraszám/hét: 2+0+0

Kreditszám: 3

Számonkérés módja: írásbeli vagy szóbeli kollokvium

Javasolt előtanulmány:

Tematika: (a kurzus célja, rövid tematikája)

Az infravörös spektroszkópia fizikai-kémiai, anyagszerkezeti alapjainak áttekintése. A rezgési spektrumok keletkezésének feltételei, a karakterisztikus csoportfrekvenciák (ismétlés). Fizikai optika az infravörös tartományban. Az infravörös spektroszkópiában alkalmazott anyagok, az infravörös spektrométer felépítése, működése. (Interferogram, spektrum, a Fourier-transzformáció mint adatfeldolgozási módszer). Az infravörös spektrum jellemzői, a spektrumot befolyásoló tényezők a klasszikus IR spektroszkópiában (a minta-előkészítés körülményei, oldószer- és koncentrációhatás, polimorfizmus, spektrális „műtermékek”, stb.).

A reflexiós spektroszkópia (Total reflectance – teljes visszaverődés, Total internal reflectance – teljes többszörös belső visszaverődés) elvi alapjai, kivitelezése, alkalmazási példák. Az ATR spektroszkópia (Attenuated Total Reflectance – csillapított teljes visszaverődés) (HATR, UATR) elvi alapjai, kivitelezése, alkalmazási példák. A szórt visszaverődés (Internal diffuse reflectance – belső diffúz reflexió) elvi alapjai, kivitelezése, alkalmazási példák

Az infravörös mikro-spektroszkópia. Az oldatfázisú infravörös spektroszkópia kvantitatív módszerei. Automatizálási lehetőségek a kvantitatív spektrum-kiértékelésben. „In situ” oldatfázisú spektroszkópia – az infravörös spektroszkópia reakciókinetikai alkalmazási lehetőségeinek kiterjesztése. A spektrumok feldolgozása, kiértékelése. Spektrumkönyvtárak: létrehozás, standardizálás, keresés. Teljesen ismeretlen anyag azonosítása – a spektrum és a mintával kapcsolatos háttérinformációk viszonya, kiegészítő vizsgálatok más analitikai technikákkal. Az infravörös spektroszkópia a minőségbiztosításban. Gyakorlati példák a korszerű infravörös spektroszkópiai módszerek ipari, műszaki és igazságügyi szakértői gyakorlatban történő alkalmazására (Esettanulmányok)

Ajánlott irodalom: Az előadások anyaga házijegyzet formában

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, reciprok tér. 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 kötősszögek 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)

MIKROHULLÁMÚ KÉMIA

Tantárgyfelelős: Országh István

A tárgy oktatója: Országh István

Óraszám/hét: 4+0+0

Kreditszám: 4

Számonkérés módja: Írásbeli és szóbeli vizsga

Javasolt előtanulmány: BSc fizikai kémia kurzusok

Célcsoport: Polimerkémikus, környezetkémikus, gyógyszerkémikus, műszeres analitikus szakirány

A kurzus célja: A nagyfrekvenciás elektromágneses tér és az anyagi rendszerek kölcsönhatásának ismertetése, értelmezése és gyakorlatban bemutatása.

A kurzus rövid tematikája:

I. A mikrohullámú sütőtől a mikrohullámú reaktorig

(10 óra bevezető és szintre hozó előadás, valamint eszközbemutató) A háztartási mikrohullámú sütő és az ipari mikrohullámú berendezések összehasonlítása. A mikrohullámú hőkezelés fizikai alapjainak kvalitatív áttekintése. Bevezetés a korszerű dielektrikum-oldószer szemléletbe. A dielektromos állandó és a komplex permittivitás. Szárítás dielektromos hőkezeléssel. Kémiai reakciók termikus és nem-termikus aktiválásának lehetőségei. Mikrohullámú térben megvalósítható szintézisek, a mikrohullámú tér lehetséges biológiai és biokémiai hatása. Mikrohullámú berendezések általános felépítése. Élet- és balesetvédelmi szabályok, sugárvédelem.

II. Mikrohullámú hőkezelés

(10 óra előadás, továbbá demonstrációs kísérletek mikrohullámú reaktorokban és a Milestone Combichem® mikrohullámú munkahelyen) Az elektromágneses tér és az anyagi rendszerek kölcsönhatásai. Korszerű dielektrikum-oldószer szemlélet. A komplex permittivitás frekvencia- és hőmérsékletfüggése. A mikrohullámú és radiofrekvenciás hőkezelés fizikai alapjai. Egyes mikrohullámú elektromágneses térben megvalósuló fizikai változások (diffúzió, fázis szeparálódás, kristályosítás stb.) értelmezése. Szárítás dielektromos hőkezeléssel.

III. Mikrohullámú aktiválás

(10 óra előadás, továbbá demonstrációs kísérletek mikrohullámú reaktorokban és a Milestone Combichem® mikrohullámú munkahelyen) Kémiai reakciók termikus és nem-termikus aktiválásának összehasonlítása. A mikrohullámú aktiválás lehetséges értelmezései: *pro & contra*. Mikrohullámú térben tapasztalt kémiai változások főbb típusai. Szerves kémiai szintézisek mikrohullámú elektromágneses térben. Oldószermentes szintézisek mikrohullámú elektromágneses térben. Mikrohullámú elektromágneses térben megvalósított szervesetlen kémiai és analitikai kémiai alkalmazások. A mikrohullámú elektromágneses tér polimer-kémiai alkalmazásai. A mikrohullámú tér biológiai és biokémiai hatásai. A mikrohullámú elektromágneses tér agrár alkalmazási lehetőségei. A mikrohullámú elektromágneses tér környezetvédelmi célú alkalmazásai.

Ajánlott irodalom:

1. von Hippel, A.R.: Dielectric Materials and Applications, Artech House,
2. Mingos, D.M.P. and Whittaker, A.G.: Microwave Dielectric Heating Effects in Chemical Synthesis, 479-514;
3. Metaxas, A.C. and Meredith, R.J.: Industrial Microwave Heating, Peter Peregrinus, London, 1983.

BEVEZETÉS A NEMLINEÁRIS KÉMIAI DINAMIKÁBA

A tárgy felelőse: Rábai Gyula

A tárgy oktatója: Gáspár Vilmos, Rábai Gyula

Heti óraszám: 2+0+0

Kredit: 3

Számonkérés: kollokvium

Javasolt félév: 2.

Javasolt előtanulmány:

Tematika:

- Nemlineáris dinamika a kémiában: történeti ismertetés.
- Lineáris stabilitásvizsgálat egyváltozós rendszerekben. jódát-arzénessav reakció. Égés.
- Fázisdiagram. Bistabilitás, hiszterézis, stabilis és instabilis stacionárius pontok.

- Lineáris stabilitásvizsgálat kétváltozós rendszerekben. Stabilis, instabilis csomó és fókuszpontok, nyeregponatok. Aktivátor, inhibitor. Nyeregcsomó és Hopf- bifurkáció. Oszcillációk. Poincaré–Bendixson elmélet.
- Oszcilláló reakciók. Osztályozásuk, jellemzőik. Belouszov–Zsabotyinszkij reakció, gerjeszthetőség. Field–Kőrös–Noyes mechanizmus, Oregonátor modell.
- Oszcilláló reakciók tervezése. Klorit-jodid reakció. pH-oszcillátorok.
- Determinisztikus káosz és jellemzői. Poincaré -metszet. Különös attraktor, logisztikus leképezés.
- Káoszsabályozás.
- Egyszerű autokatalitikus frontok. Kémiai hullámok. Diszperziós görbe, kritikus méret. Céltábla mintázat és spirális hullámok.
- Egyéb tér- és időbeli mintázatok. Diffúziókülönbség indukálta szerkezetek, Turing szerkezetek. Önreprodukáló mintázatok.
- Mintázatképződés biológiai rendszerekben.

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.). Az izoprénvázas vegyületek (terpének, karotinoidok, szteroidok) és az alkaloidok tárgyalása az alábbi szempontok szerint: csoportosítás, előfordulás, izolálás, szerkezetfelfedezés, szintézis, bioszintézis, biológiai szintézis, biológiai hatás és gyakorlati alkalmazás.

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)

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: Elek Sándor

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.

KIROPTIKAI SPEKTROSZKÓPIA

Tantárgyfelelős: Kurtán Tibor

A tárgy oktatója: Kurtán Tibor

Óraszám/hét: 2 + 0 +0

Kreditszám: 3

Számonkérés módja: kollokvium

Javasolt előtanulmány: Szerkezetvizsgáló módszerek

Tematika: (a kurzus célja, rövid tematikája)

A tárgy célja, hogy megismertesse a hallgatókat a molekulaszerkezet és az optikai aktivitás közötti összefüggéssel, a kiroptikai módszerek alkalmazásával a molekulák abszolút konfigurációjának és konformációjának meghatározásában.

A csoportelmélet alapjai. Az optikai rotációs diszperziós (ORD) és a cirkuláris dikroizmus (CD) spektroszkópia elmélete. Az empirikus kiroptikai szabályok tárgyalása kromoforrendszerként. Az optikai aktivitással, valamint a molekulák térszerkezetével összefüggő kiroptikai jelenségek előjelének levezetése a Sznatzke-féle szemléletes kvalitatív MO módszer segítségével.

Ajánlott irodalom:

1. Antus S., Mátyus P.: Szerves Kémia I., Nemzeti Tankönyvkiadó, Budapest, 2005, 82-92. oldal
2. Kovács I., Szőke J.: Molekulaspektroszkópia, Akadémiai Kiadó, Budapest, 1987, 442-522. oldal
3. E. L. Eliel, S. H. Wilen: Stereochemistry of Organic Compounds. Wiley, New York, 1994.
4. N. Berova, K. Nakanishi, R.W. Woody: Circular Dichroism, Wiley, New York, 2000.

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 gátlhatósága, 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 keményítőtöbontó 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.

PROFESSIONAL COMMUNICATION IN ENGLISH (Szakmai nyelvhasználat angol nyelven)

Tantárgyfelelős: Dr. Nábrádi Zoltánné

A tárgy oktatója: Dr. Semseiné Szekeres Edit

Óraszám/hét: 0+0+4 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.

4. Analitikus vegyész szakirány

KEMOMETRIA I.

Tantárgyfelelős: Fábián István

A tárgy oktatója: Braun Mihály

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. Jóslási 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.

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.

KEMOMETRIA II.

Tantárgyfelelős: Fábián István

A tárgy oktatója: Braun Mihály

Óraszám/hét: 2+0+0 Periódus 3. félév

Kreditszám: 3

Számonkérés módja: kollokvium

Javasolt előtanulmány: Kemometria I.

Tematika: (A kurzus célja, rövid tematikája)

A kurzus célja a kísérlettervezési technikák ismertetése, bevezetés a sokváltozós analízis kemometriai alkalmazásába.

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. Töbváltozós 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 koefficienssek. 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: Braun Mihály

A tárgy oktatója: Braun Mihály

Óraszám/hét: 2+0+0 Periódus 4. félév

Kreditszám: 3

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: Training and Teaching Springer Verlag
2. Palotai K., Györi P. , 1998. A TQM elmélete és gyakorlata. IMSYS Vezetési Tanácsadó Kft. Budapest

MINTAVÉTEL, MINTAELŐKÉSZÍTÉS, ANALITIKAI TESZTEK

Tantárgyfelelős: Posta József

A tárgy oktatója: Posta József, Braun Mihály

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, szintezett eljárások elvének és gyakorlatának megismerése.

A tantárgy rövid leírása: Gázok, aeroszolok, 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. Kódok, 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 tesztsíkok, 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.

KÖRNYEZET TÖMEGSPEKTROMETRIA

Tantárgyfelelős: Lázár István

A tárgy oktatója: Lázár István, Nagy Lajos

Óraszám/hét: 1+0+2

Kreditszám: 3

Számonkérés módja: K

Javasolt előtanulmány: Analitikai kémia II. (BSc)

Tematika: (a kurzus célja, rövid tematikája)

A hallgatók megismertetése a környezeti analitikában előforduló tömegspektrometriás analitikai mérés technikai eljárások elméleti és gyakorlati alapjaival, a használatos készülékek felépítésével, alkalmazási területeivel, az EI tömegspektrumok értékelésének általános módszereivel és a tömegspektrumokból nyerhető információk feldolgozásával.

Az előadás tartalma:

A környezeti analitikában használt tömegspektrométerek és a kombinált technikák (GC, LC) általános ismertetése, működési elve, legfontosabb jellemzőik, felhasználási területeik. A környezeti analitikában használatos tömegspektrométerekben alkalmazott ionizációs források (módok) főbb típusai és jellemzése, különös tekintettel az EI, CI és ESI-re. A kvadrupól tömegspektrométerek szerkezete, főbb típusaik, egyszerű, 3D illetve lineáris ioncsapdás, tripla kvadrupól készülékek, mágneses szektoros és nagy felbontású berendezések. A detektorok típusai, adatfeldolgozó rendszerek, spektrumok értékelését/azonosítását segítő számítógépes módszerek. Térítéses illetve ingyenes spektrumkönyvtárak használata.

A tömegspektrumokkal kapcsolatos alapfogalmak általános ismertetése, az izotópeloszlás felismerése, használata. Az elektronionizáció részletes tárgyalása, az ionok képződési folyamata, ionizációs energiák jelentősége. A fragmentáció szerepe a szerkezetazonosításban, hasadási folyamatok, azok értelmezése, neutrális veszteses folyamatok, átrendeződések, ion-gyök és gyök-gyök szekunder reakciók megjelenése, metastabilis ionok felismerése és felhasználása. A spektrumok általános kiértékelésének módszerei, kiértékelő algoritmus.

A szeminárium tartalma:

A tömegspektrumokkal kapcsolatos alapfogalmak (báziscsúcs, molekulaion, ionok gyakorisága, izotópeloszlási mintázatok), az izotópeloszlás felismerése, használata. Ionok,

gyökök képződésének alapjai, paritás. Az EI spektrumokban a molekulaion azonosításának problémája, lehetséges gyakorlati megoldások. A moláris tömeg meghatározási lehetőségei a tömegspektrumokból. Elemi összetétel számítása, lehetséges szerkezetek számbavétele. A molekula telítetlenségének a mértéke, a gyűrűk számának meghatározása. A nitrogén szabály. Az elektronionizáció folyamatának példákön keresztüli áttekintése, az ionok képződési folyamata, ionizációs energiák jelentősége. A fragmentáció értelmezése, szerepe a szerkezetazonosításban, a hasadási folyamatok lehetséges módjai, azok értelmezése, neutrális veszteses folyamatok, átrendeződések, ion-gyök és gyök-gyök szekunder reakciók megjelenése, metastabilis ionok felismerése és felhasználása. A spektrumok általános kiértékelésének módszerei, kiértékelő algoritmus. A spektrumkönyvtárak használatának gyakorlása, a megfelelő egyezés megtalálása. A 3D és a szimpla kvadrupól tömegspektrométerrel nyerhető tömegspektrumok összehasonlítása, a különbségek értelmezése. A CI-val nyerhető tömegspektrumok jellegzetességeinek az áttekintése. Több dimenziós tömegspektrometria (MSⁿ) felhasználása. A környezetben előforduló, fokozottan veszélyes illetve betiltott vegyületek tömegspektrumának az áttekintése, jellegzetességeik megállapítása, értelmezése.

Ajánlott irodalom:

1. Dr. Dinya Zoltán: Szerves tömegspektrometria, , egyetemi jegyzet, Kossuth Egyetemi Kiadó, 2003
2. Dinya Zoltán-Suszter Gabriella-Kiss Attila-Papp Gábor-Bak István: Környezetszennyező szerves vegyületek analitikája (egyetemi jegyzet, Kossuth Egyetemi Kiadó, 2002)
1. 3..R. M. Smith, Understanding Mass Spectra: A Basic Approach (2nd ed.), John Wiley and Sons, Hoboken, New Jersey, 2004

ÉLELMISZERANALITIKA

Tantárgyfelelős: Győri Zoltán

A tárgy oktatója: Győri Zoltán

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 – Analitik. 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. Nanostuktúrák 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

Felelős: M. Nagy Noémi

A tárgy oktatója: M. 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: (a kurzus célja, rövid tematikája)

Az atommagsugárzások alkalmazása a kémiai analízisban. Roncsolásmentes és roncsolásos anyagvizsgálatok. Kvalitatív kvantitatív elemzési módszerek. Kémiai formák és az anyagszerkezet vizsgálata radioaktív módszerekkel ill. sugárzásokkal. Gyakorlati alkalmazások a környezetvédelemben, iparban, mezőgazdaságban, orvosi, biológiai felhasználások.

Ajánlott irodalom:

1. Tölgyessy J.: Magsugárzás a kémiai analízisben, Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1965.
2. D.De Soete, R. Gijbels, J. Hoste: Neutron activation analysis, Wiley-Interscience, London, 1983.
3. H.A. Das, A. Faanhof, H.A. van der Sloot: Environmental Radioanalysis, Elsevier, Amszterdam, 1983.
4. A. Vértes, S. Nagy, Z. Klencsár: Handbook of nuclear chemistry, Kluwer Academic Publishers, Boston, 2003.

ATOMABSZORPCIÓS SPEKTROSKÓPIA

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 összetételű lángok jellemzése, analitikai fontossága. A minta hevített grafitcsőben lejátszódó 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

ICP-OES/MS

Tantárgyfelelős: Braun Mihály

A tárgy oktatója: Braun Mihály

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

Kreditszám: 3

Számonkérés módja: kollokvium

Javasolt előtanulmány: Műszeres analitika (M.Sc.)

Tematika: (A kurzus célja, rövid tematikája)

A kurzus célja az induktív csatolású plazma optikai emissziós spektrometria (ICP-OES) és – tömegspektrometria (ICP-MS) alapjainak megismertetése.

Az induktív csatolású plazma (ICP) jelentősége az analitikai spektrometriában. Atmoszférikus nyomású plazmák típusai és tulajdonságaik. Az atom emissziós spektrometria alapjai.

Az induktív csatolású optikai emissziós spektrométerek felépítése. Rádiófrekvenciás generátorok, plazmafákják, mintabevivő rendszerek. Optikai elemek, monokromátorok és polikromátorok, detektálás. Folyadékok mintabevitele. Szilárd minták analízise. Szuszpenziók vizsgálata. Közvetlen mintabevitel. Elektrotermikus párologtatás. ICP-OES mérések optimalizálása. Működési paraméterek. Kalibráció, kimutatási határ, méréstartomány, reprodukálhatóság és stabilitás meghatározása. Zavaróhatások és kiküszöbölésük. ICP-OES technikák alkalmazási területei. Környezeti minták analízise. Geológiai és ipari alkalmazások. Kapcsolt technikák. Induktív csatolású plazma tömegspektrométerek (ICP-MS) felépítése. Plazma mint ionforrás. Az ICP-OES és az ICP-MS készülékek összehasonlítása (felépítés, teljesítőképesség). Mintabeviteli módszerek ismertetése. Hogyan jutnak az ionok a plazmából a tömegspektrométerbe? Kapcsolat az ICP- és az MS között: az interfész. Ionfókuszálás. Tömeganalizátorok (mágnesszektoros, kvadrupol és repülésidő tömegspektrométerek). Detektorok felépítése és működése. ICP-MS mérések optimalizálása. ICP-MS technikák gyakorlati alkalmazási területei.

Ajánlott irodalom:

1. Pokol Gy., Sztatisz J., 2003. Analitikai Kémia I. Műegyetemi Kiadó, Budapest
2. Fábíán I. (szerk), Braun M., Daróciné Somogyi A., Deák Gy., Kathó Á., Kiss L., Lente G., Nagy I., Papp L., Párkányiné Berka M., Posta J. (1998): Műszeres analitikai kémiai gyakorlatok. KLTE, Debrecen.
3. Boss, Ch, B., Freeden, K.J. 1997. Concepts, instrumentation, and techniques in inductively coupled plasma optical emission spectrometry. Perkin Elmer Corporation.

RÉTEGKROMATOGRÁFIA

Tantárgyfelelős: Fábíán István

A tárgy oktatója: Fatér Zsuzsanna

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

Kreditszám: 3

Számonkérés módja: kollokvium

Javasolt előtanulmány: Elválasztástechnika (B.Sc.)

Tematika: (A kurzus célja, rövid tematikája)

A kurzus célja a különböző rétegekromatográfiás módszerek megismertetése a hallgatókkal. Az előadás során a következő témakörök kerülnek tárgyalásra: 1. Kromatográfiás technikák (kromatográfiás alapfogalmak, rétegekromatográfiák helye a kromatográfiás technikák között, rétegekromatográfiás technikák) 2. Rétegekromatográfia elmélete (klasszikus rétegekromatográfia, kényszeráramlásos technikák elméleti alapjai) 3. Rétegekromatográfiás állófázisok 4. Mozgófázisok optimalizálása (optimalizálási módszerek, PRIZMA modell) 5. Rétegekromatográfiás működési paraméterek (klasszikus vékonykromatográfia (LTC), túlnyomásos rétegekromatográfia (OPLC)) 6. Rétegekromatogramok értékelése és dokumentálása (azonosítás, mennyiségi értékelés, dokumentálás, módszerei: denzitometria, videodokumentációs rendszerek) 7. Validálás (alapfogalmak, validálási eljárás tervezése, kivitelezés, értékelés) 8. Korszerű kifejlesztési technikák (automatikus kifejlesztési kromatográfiás kamrák (ADC, AMD),

kényszeráramlásos technikák (OPLC, RPC), kapcsolt technikák 9. Rétegekromatográfia lehetőségei és korlátai. Az előadáshoz egy demonstrációs gyakorlat is kapcsolódik melynek során a következő témakörök kerülnek feldolgozásra: 1. Mozgófázis optimalizálása, 2. Rétegekromatográfias paraméterek (TLC, OPLC) vizsgálata, 3. Rétegekromatogramok értékelése

Ajánlott irodalom:

1. Sydner, R.L.; Kirkland, J.J.: Bevezetés az intenzív folyadékkromatográfiába, Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1979
2. Dr. Kovácsné Dr. Hadady K.: Hagyományos és modern rendszerű folyadékkromatográfia, egyetemi jegyzet, Kossuth Lajos Tudományegyetem, 1995.
3. Kellner, R.; Mermet, J.-M., Otto M., Widmer, H.M.: Analytical Chemistry, Wiley VCH, 1998.

FELADATCENTRIKUS MODERN ANALITIKA

Tantárgyfelelős: Lente Gábor

A tárgy oktatója: Lente Gábor

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

Kreditszám: 3

Számonkérés módja: K

Javasolt előtanulmány: Analitikai kémia II (B.Sc.)

Tematika: (a kurzus célja, rövid tematikája)

A tárgy célja, hogy feladatcentrikus szemléletmód segítségével elmélyítse a műszeres analitikai alapismeretekkel már rendelkező hallgatóknak a modern analitikai kémiában és határterületein használatos módszerekkel kapcsolatos ismereteit. Külön hangsúlyt kapnak a feladatnak leginkább megfelelő analitikai módszer kiválasztásával és a használt analitikai módszer által biztosított maximális információmennyiség kinyerésével kapcsolatos problémák is.

A kurzus tematikája számos konkrét példa bemutatásával a következő, a hétköznapiakhoz közvetlenül kapcsolódó analitikai feladatköröket érinti: kriminalisztikai analitika, archeometriai analitika, doppingvizsgálatok és kábítószerkimutatás, gyógyszerek analitikája, élelmiszerek és az ivóvíz analitikája.

Ajánlott irodalom:

1. Kellner, R.; Mermet, J.-M., Otto M., Widmer, H.M.: Analytical Chemistry, Wiley VCH, 1998.
2. Analytical Chemistry, American Chemical Society, folyóirat.
3. Environmental Science and Technology, American Chemical Society, folyóirat.

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 szekvenálásánál. 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), elektro-kromatográfia (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

NMR OPERÁTOR KÉPZÉSI GYAKORLAT I.

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:.

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.

5. Szintetikus vegyész szakirány

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.

A határmolekulapályák fogalma, felhasználásuk kémiai reakciók leírására; a Klopman–Salem-egyenlet és értelmezése. sztereoelektronhatás fogalma, megnyilvánulásai. Baldwin-szabályok. legkisebb mozgás elve, felhasználásai kémiai reakciók értelmezésében. Mechanizmus- és reakciótípusok, reaktív intermedierek (karbokationok, karbanionok, szén-gyökök, karbénok, nitrénok képződése, stabilitása, szerkezete, átalakulásaik). Periciklusos reakciók fogalma, típusai és az értelmezésükre alkalmazott módszerek (korrelációs diagramok szerkesztése; az FMO módszer alkalmazása). Elektrociklusos reakciók. Cikloadíciós reakciók: normál- és fordított elektronszükségletű reakciók; a regio- és a sztereoszelektivitás értelmezése; Lewis-sav katalízis; pozíció- és periszelektivitás; 1,3-dipoláris cikloadíció. Keletróp reakciók; szigmatróp átrendeződések.

Oldószereffektusok 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 lánccmechanizmusú 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: Patonay Tamás

A tárgy oktatója: Patonay Tamás

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)

A tárgy célja a sztereoszelektív (enantioszelektív és diasztereoszelektív) szintézisek alapjainak megismertetése, a biológiailag aktív és természetes vegyületek szintézisének alkalmazott legfontosabb módszerek bemutatása példák segítségével.

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. Funkciócsoport módosítással elérhető királis kiindulási és segédanyagok, enantiomertiszta/enantiomerben dúsult célvegyületek előállítása új sztereogén egység generálása nélkül. Aszimmetriás szintézisek alapelvei, Cram-szabály, Prelog-szabály. Az

aszimmetriás szintézisek típusai: első generációs (szubsztrát-kontrollált), második generációs (segédanyag-kontrollált), harmadik generációs (reagens-kontrollált) és negyedik generációs (katalizátor-kontrollált) eljárások. Többszörös sztereodifferenciálás.

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. Polimerrendszerek: 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, Marcel 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, koncentrálna 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, antianginászerek, 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: Patonay Tamás

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 aeroszolok, 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 sztereoképzőfelfedezésében.

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.

MODERN TÖMEGSPEKTROMETRIÁS MÓDSZEREK

Tantárgyfelelős: Kéki Sándor

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

Óraszám/hét: 2+0+0

Periódus: 4. félév

Kreditszám: 3

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.

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

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 gyógyszerkémiaiában. 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.

KORSZERŰ EGY- ÉS KÉTDIMENZIÓS NMR MÓDSZEREK

Tantárgyfelelős: Kövér Katalin

A tárgy oktatója: Kövér Katalin

Óraszám/hét: 0+1+3

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 1D és 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 3 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

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 erőter 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 lépéseihez. Súlypontok: szénhidrátok szerepei biológiai rendszerekben, felhasználási lehetőségeik; szerkezeti sajátosságaik 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 gyűrűnyitásuk.

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 KÉMIAJA

Tantárgyfelelős: Patonay Tamás

A tárgy oktatója: Patonay Tamás

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 típusszintézisnek 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 (fungicidok). Szervetlen vegyületek, szerves fémvegyületek, kéntartalmú szerek. Egyéb fungicid molekulák (karboxanilidek, imidek, triazol- és imidazol-származékok stb.), antibiotikumok. Gyomirtók (herbicidek) és növényi növekedés szabályozók (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.

TERMÉSZETES O-HETEROCIKLUSOK

Tantárgyfelelős: Antus Sándor

A tárgy oktatója: Antus Sándor

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)

Az előadássorozat a természetes eredetű oxigén-heterociklusos vegyületek legjelentősebb csoportjával a flavonoidokkal foglalkozik. Ismerteti a természetes anyagcsalád több csoportját, tárgyalja azok jellemző képviselőinek bioszintézisét, szerkezetfelderítését, totál szintézisét, fiziológiai hatását és az egyes családok közötti biogenetikai és kémiai kapcsolatokat. A fenolkémiai tájékozottságon túlmenően lehetőséget kínál a sztereokémiai ismeretek további elmélyítésére is.

Ajánlott irodalom:

1. R. C. Elderfield (Ed.): Heterocyclic Compounds Vol.2., Polycyclic Five- and Six-Membered Compounds Containing One O or S Atom, Wiley, New York, 1951.
2. G. P. Ellis (Ed.): Chromenes, Chromanones and Chromones, Wiley, New York, 1977.
3. J. B. Harborne, T. J. Mabry, H. Mabry (Eds.): The Flavonoids, Chapman & Hall, London, 1975.
4. J. B. Harborne, T. J. Mabry, H. Mabry (Eds.): The Flavonoids: Advances in Research, Chapman & Hall, London, 1982;
5. J. B. Harborne: The Flavonoids: Advances in Research since 1980, Chapman & Hall, London, 1988.

Vegyész MSc diplomamunka (a jelentkezés és tárgyfelvétel előírásai)

1. A diplomamunka lehetséges témaköre és tantervi elhelyezése:

A diplomamunka max. 30-50 oldal terjedelmű, önálló kémiai probléma megoldását bemutató alkotás. A diplomamunka értéke **30 kredit**, amely az előfeltételek megléte esetén **15-15 kredit** bontásban a képzés **3. és 4. félévében** teljesítendő.

Mivel a képzés szakirányát 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 43 kreditnek felel meg, amelyből a mintatanterv szerint 33 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.

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.

1. A diplomamunka bemutatása és megvédése.

A diplomamunka max. 30-50 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 kész diplomamunkát a záróvizsga megkezdése előtt 1 fő hivatalos bíráló értékeli, akinek személyét az Intézet Tanácsa hagyja jóvá. A hivatalos bíráló a munka minősítésére is javaslatot tesz, de a záróvizsgát elégtelen minősítési javaslat esetén is el kell kezdeni. A diplomamunka bemutatása nyilvános Intézeti ülésen történik. A nyilvános védést a szakmai záróvizsgától elkülönült időpontban kell megrendezni, de eredménye a záróvizsga részét fogja képezni. Az ülésen a jelölt max. 10 percen ismerteti munkájának főbb eredményeit, majd válaszol a hivatalos bíráló korábban megfogalmazott kérdéseire/megjegyzéseire. A bírálóknak kötelessége, hogy a munkához kapcsolódóan kérdéseket tegyenek fel, amelyek akár a hiányosságok/tévedések korrekcióját, akár a témával összefüggő általánosabb kérdések felvetését jelenthetik. A vita további részében az ülés valamennyi résztvevője tehet fel kérdéseket. A bemutatás és védelem értékelése az ülés végén történik.

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 4 témakörbe csoportosítjuk:

A – témakör: szervetlen, analitikai és fizikai kémiai ismeretek

B – témakör: szerves, bio- és alkalmazott kémiai ismeretek

C – témakör: szakirányú analitikai kémiai ismeretek

D – témakör: szakirányú szintetikus kémiai 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, szakirányának megfelelően az alábbi módon összeállított témakörökből:

- szakirány nélküli képzés esetén: 1-1 tétel az A és B témakörökből
- analitikus szakirány esetén: 1-1 tétel a B és C témakörökből
- szintetikus szakirány esetén: 1-1 tétel az A és D témakörökből

A vizsgán a jelölt mindkét témában 10-15 percben ad számot tudásáról, amelynek eredményét a vizgabizottság 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.