

EÖTVÖS LORÁND TUDOMÁNYEGYETEM - TERMÉSZETTUDOMÁNYI KAR
KÉMIA DOKTORI ISKOLA KÉPZÉSI TERVE

I. [Kémia Doktori Iskola](#)

Tudományág megnevezése: Természettudományok

Képzési forma: doktori (Ph.D.) képzés

Képzési cél: a tudományos fokozat megszerzésére való felkészítés, felsőoktatási gyakorlat megszerzése

Képzési idő: 6 félév

Tagozat: nappali

Finanszírozás: államilag támogatott ill. költségtérítéses képzés

A képzésbe történő belépés követelménye: mesterfokozat és sikeres felvételi vizsga

Nyelvi követelmények: egy államilag elismert „C” típusú középfokú nyelvvizsga

A képzés zárul: abszolutórium

Az abszolutóriumhoz szükséges kreditek száma: 180

Kreditszerzés módjai/moduljai: tanulmányi kredit (24), kutatási kredit (156)

A doktori iskolai képzés felelőse: [Dr. Inzelt György](#), egyetemi tanár, a doktori iskola vezetője

II. A képzésért felelős kar megnevezése: Természettudományi Kar

III. Doktori oktatási programok:

Programfelelősök:

Szintetikus kémia, anyagtudomány, biomolekuláris kémia:

[Dr. Perczel András](#)

Elméleti és fizikai kémia, anyagszerkezetkutatás:

[Dr. Surján Péter](#)

Analitikai, kolloid-és környezetkémia, elektrokémia:

[Dr. Záray Gyula](#)

Képzési/Tanulmányi modul (megszerezendő kredit: 24):

KÉM/1 Komputációs statisztikus mechanika

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető

KÉM/2 Szupramolekuláris kémia

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető

KÉM/3 A tudományos kutatás módszertani és etikai kérdései

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető

KÉM/4 A clusterkémia új irányzatai

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető

KÉM/5 Szerkezeti-szervetlen kémia haladóknak

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető

KÉM/6 Vázátrendeződések a heterociklusos kémiában

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető

KÉM/7 Kvantumkémia és szerkezetkutatás, haladóknak

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető

KÉM/8 Molekulamozgások kvantummechanikája II.

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető

KÉM/9 Kolloidális gyógyszerhordozók stabilitása

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető

KÉM/10 Makromolekulák határfelületi viselkedése

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető

KÉM/11 Elektromigrációs módszerek

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető

KÉM/12 Kvantumkémiai molekulamodellezés

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető

KÉM/13 Folyadékkristályok

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető

KÉM/14 Számítógépes kémia

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető

EÖTVÖS LORÁND TUDOMÁNYEGYETEM - TERMÉSZETTUDOMÁNYI KAR
KÉMIA DOKTORI ISKOLA KÉPZÉSI TERVE

- KÉM/15** Elektromos kölcsönhatás kolloid rendszerekben
3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető
- KÉM/16** Tenzidek önszerveződése oldatban
3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető
- ~~**KÉM/17** Gyűrűzáródási reakciók
3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető~~
- KÉM/18** Heteroaromás vegyületek kémiája
3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető
- KÉM/19** Szénhidrátok kémiája haladóknak / Biomolekuláris kémia
3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető
- KÉM/20** Sztereokémia és kiroptikai spektroszkópia
3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető
- KÉM/21** Zöld kémia
3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető
- KÉM/22** Ciklodextrinek kémiája
3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető
- KÉM/23** Biokonjugátumok
3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető
- KÉM/24** Válogatott fejezetek a peptid- és fehérjekémiából
3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető
- KÉM/25** Az elektrokémia története
3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető
- KÉM/26** Elméleti elektrokémia
3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető
- KÉM/27** Makromolekuláris kémiai technológia alapjai
3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető
- KÉM/28** Principles of molecular engineering of macromolecules
3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető
- KÉM/29** Szerves kémia haladóknak
3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető
- KÉM/30** Enantiomerek elválasztása kromatográfiai technikákkal
3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető
- KÉM/31** Röntgendiffrakció, új irányzatok
3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető
- KÉM/32** A neurokémia alapjai
3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető
- KÉM/33** Alkalmazott statisztikai módszerek
3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető
- KÉM/34** Modern reakciókinetika
3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető
- KÉM/35** Bioanyagok felületkémiája
3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető
- KÉM/36** Szilárd / folyadék határfelületi jelenségek, nanorétegek
3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető
- KÉM/37** Fémek elektrokémiája és korróziója haladóknak
3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető
- ~~**KÉM/38** Főcsoportbeli elemek fémorganikus kémiája
3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető~~
- KÉM/39** Fémorganikus vegyületek a szerves szintézisben
3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető
- KÉM/40** Modern szintézismódszerek
3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető
- KÉM/41** Elektrokémiai kísérleti módszerek elméleti háttérrel
3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető
- KÉM/42** Bevezetés az elemi reakciók kinetikájának elméletébe

EÖTVÖS LORÁND TUDOMÁNYEGYETEM - TERMÉSZETTUDOMÁNYI KAR
KÉMIA DOKTORI ISKOLA KÉPZÉSI TERVE

- 3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető
- KÉM/43** Válogatott fejezetek a kvantumkémiaiából
3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető
- KÉM/44** Bioorganikus kémia haladóknak
3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető
- KÉM/45** Bioszerves kémia haladóknak
3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető
- KÉM/46** Molekulák alakja, hasonlósága és komplementaritása
3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető
- KÉM/47** Ciklo-és nagytagszámú peptidok szintézise
3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető
- KÉM/48** Térhálós szerkezetek kolloidkémiaiája
3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető
- KÉM/49** Molekulamodellkezés
3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető
- KÉM/50** Oszilláció és egyéb dinamikai jelenségek a kémiában
3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető
- KÉM/51** Fehérjék és peptidok térszerkezetvizsgálata NMR spektroszkópiail módszerekkel
3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető
- KÉM/52** Pulzusszekvenciák az NMR szerkezetvizsgálóban
3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető
- KÉM/53** GC-MS és HPLC az analitikában
3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető
- KÉM/54** Kvantumkémiai módszerek
3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető
- KÉM/55** Kvantumkémiai néhány modern eljárása
3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető
- KÉM/56** Rendezetlenség kondenzált fázisokban
3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető
- KÉM/57** Szerves fluorvegyületek kémiája
3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető
- KÉM/58** Felületvizsgáló módszerek IV.
3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető
- KÉM/59** Oldott és szilárd anyagok NMR spektroszkópiájának elmélete és mérés technikája
V.
3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető
- KÉM/60** Fizikai szerves kémia
3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető
- KÉM/61** Nagyérzékenységű nukleáris módszerek a környezeti analitikában
3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető
- KÉM/62** Válogatott fejezetek a klasszikus fizikai kémiából
3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető
- KÉM/63** Fémkomplexek oldatreakciói és homogén katalízis
3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető
- KÉM/64** Homogén katalízis
3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető
- KÉM/65** Biopolimerek elméleti vizsgálata
3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető
- KÉM/66** Alkalmazott NMR-spektroszkópia
3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető
- KÉM/67** Az NMR spektroszkópia elméleti alapjai
3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető
- KÉM/68** Matematikail módszerek a kvantumkémiaiában I.
3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető
- KÉM/69** Matematikail módszerek a kvantumkémiaiában II.

EÖTVÖS LORÁND TUDOMÁNYEGYETEM - TERMÉSZETTUDOMÁNYI KAR
KÉMIA DOKTORI ISKOLA KÉPZÉSI TERVE

- 3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető
- KÉM/70** Peptidmimetikumok
3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető
- KÉM/71** Elektródfolyamatok kinetikája
3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető
- KÉM/72** A kvantumkémia modern módszerei
3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető
- KÉM/73** A molekuladinamika spektroszkópiai alkalmazásai
3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető
- KÉM/74** A fotoionizáció spektroszkópiai alkalmazása
3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető
- KÉM/75** Fémorganikus kémia II.
3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető
- KÉM/76** Sokváltozós statisztikai módszerek
3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető
- KÉM/77** Fémek korróziójának vizsgálata
3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető
- KÉM/78** Aszimmetrikus szintézisek
3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető
- KÉM/79** A gázkromatográfia alkalmazásai
3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető
- KÉM/80** Elválasztástechnika a szerves kémiában
3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető
- KÉM/81** Energiatermelés által okozott környezeti és egészségi károk
3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető
- KÉM/82** Lángok kémiája és fizikája
3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető
- KÉM/83** Reakciómechanizmusok vizsgálata
3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető
- KÉM/84** Alkalmazott számítógépes szimulációk
3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető
- KÉM/85** Elemi reakciódinamika
3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető
- KÉM/86** Tömegspektrometria II.
3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető
- KÉM/87** Nukleáris szerkezetvizsgáló módszerek
3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető
- KÉM/88** A plazmaspektroszkópia analitikai alkalmazása
3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető
- KÉM/89** Környezeti analitika
3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető
- KÉM/90** Dúsításos módszerek az atomspektroszkópiában
3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető
- KÉM/91** Sűrűségfüggő módszerek az elektronszerkezet leírására
3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető
- KÉM/92** Vákuumtechnika
3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető
- KÉM/93** Elemi és alkalmazott kvantumkémia
3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető
- KÉM/94** Proteome Analysis and Protein Structure
3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető
- KÉM/95** Alkalmazott elektrokémia előadás
3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető
- KÉM/96** Fotofizika és fotokémiai kinetika
3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető

EÖTVÖS LORÁND TUDOMÁNYEGYETEM - TERMÉSZETTUDOMÁNYI KAR
KÉMIA DOKTORI ISKOLA KÉPZÉSI TERVE

- KÉM/97** Sokváltozós statisztikai módszerek II. Paraméterbecslés
3 kredit, elmélet, választható, nem ismételhető
- KÉM/98** Ciklodextrinek, mint a szénhidrátalapú nanotechnológia sokoldalú képviselői
3 kredit, elmélet, választható, nem ismételhető
- KÉM/99** Számítógépes gyógyszertervezés
3 kredit, elmélet, választható, nem ismételhető
- KÉM/100** Lecture Series in English
3 kredit, elmélet, választható, nem ismételhető
- KÉM/101** Biomolekulák tömegspektrometriás vizsgálata
3 kredit, elmélet, választható, nem ismételhető
- KÉM/102** NMR spektroszkópia elmélete és mérés technikája
3 kredit, elmélet, választható, nem ismételhető
- KÉM/103** Szilárd anyagok NMR spektroszkópiája
3 kredit, elmélet, választható, nem ismételhető
- KÉM/104** A fehérjekrisztallográfia módszerei
3 kredit, elmélet, választható, nem ismételhető
- KÉM/105** Szilíciumorganikus kémia
3 kredit, elmélet, választható, nem ismételhető
- KÉM/106** Elméleti Szerves Kémia II.
3 kredit, elmélet, választható, nem ismételhető
- KÉM/107** Szerves és biomolekuláris kémia újabb eredményei
3 kredit, elmélet, választható, nem ismételhető
- KÉM/108** A biológiai fehérjeszintézis kémiája
3 kredit, elmélet, választható, nem ismételhető
- KÉM/109** Szerves makromolekulák hőbomlása
3 kredit, elmélet, választható, nem ismételhető
- KÉM/110** Sztochasztikus folyamatok a fizikai kémiában
3 kredit, elmélet, választható, nem ismételhető
- KÉM/111** Elektrokémiai kísérleti módszerek elméleti háttere II.
3 kredit, elmélet, választható, nem ismételhető
- KÉM/112** A Monte Carlo számítógépes szimulációs módszer
3 kredit, elmélet, választható, nem ismételhető
- KÉM/113** Molekuláris felismerés alapjai
3 kredit, elmélet, választható, nem ismételhető
- KÉM/ÁH-KV** Áthallgatás, kreditátvitel

Kutatási modul (megszerezhető kredit: 156):

- KÉM/KUT** Irányított kutatómunka (megszerezhető kredit 24/I-II.tanév, 27/5-6. szemeszter)
1 kredit/30 hallgatói tanulmányi munkaóra, doktori kutatás, választható, nem ismételhető
- KÉM/BESZ** Beszámoló (megszerezhető kredit: 6)
6 kredit, választható, nem ismételhető

Kurzusleírások:

Képzési/Tanulmányi modul (megszerzendő kredit: 24):

- KÉM/1** Komputációs statisztikus mechanika
[Baranyai András – BAAKABT.ELTE](#)
3 kredit, elmélet, választható, nem ismételhető
Termodinamikai folyamatok elméle alapjai. Statisztikus termodinamika alapjai.
Számítási módszerek alkalmazása a statisztikus termodinamikában.

EÖTVÖS LORÁND TUDOMÁNYEGYETEM - TERMÉSZETTUDOMÁNYI KAR
KÉMIA DOKTORI ISKOLA KÉPZÉSI TERVE

KÉM/2 Szupramolekuláris kémia

Bareza Lajos —

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető

Molekula-kölcsönhatások elmélete, típusai. Koronaéterek. Ciklodextrinek. Kalixarének. Szerkezet és kölcsönhatási módok. Stabilitás, dinamika.

KÉM/3 A tudományos kutatás módszertani és etikai kérdései

Beck Mihály — [BEMQAAT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető

A parajelenségek megjelenése a természettudományos oktatásban. Kritikai szemlélet kialakítása kutatókban.

KÉM/4 A clusterkémia új irányzatai

[Csákvári Béla](#) — [CSBLAAT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető

A clusterkémia alapjai. A Wade-elmélet alkalmazása klaszterekre. Nemesgázklaszterek.

KÉM/5 Szerkezeti szervetlen kémia haladóknak

[Csákvári Béla](#) — [CSBLAAT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető

Szervetlen vegyületek térszerkezete. Összetett rendszerek. Klaszterek és a Wade-szabály.

KÉM/6 Vázátrendeződések a heterociklusos kémiában

[Csámpai Antal](#) — [CSAKAAT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető

Átrendeződési reakciók típusai. Kationos átrendeződések. Gyökös átrendeződések. Anionos csoportvándorlások. Periciklusos átalakulások.

KÉM/7 Kvantumkémia és szerkezetkutatás

[Császár Attila](#) — [CSAKABT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető

Az elektronszerkezet-számítás magasabb szintű módszerei. Az elektronszerkezet-számítás mágikus kockája. Elektronkorreláció. Relativisztikus hatások a szerkezetkutatásban. Potenciális energia (PES) és tulajdonság (DMS) hiperfelületek. Hiperfelületek kvantumkémiai meghatározása, pontossága és felhasználása. A Born-Oppenheimer közelítés és annak sérülése. Nem-merev forgásokon alapuló spektroszkópiák. Anharmonikus oszcillátorok a spektroszkópiában. Egyensúlyi és hőmérséklet-függő rezgésileg átlagolt szerkezetek. Anyag és sugárzás kölcsönhatásának félklasszikus és kvantummechanikai tárgyalása. Diffrakciós technikák. Kötelező irodalom: (1) Attila Szabo, Neil S. Ostlund, Modern Quantum Chemistry: Introduction to Advanced Electronic Structure Theory, Dover, 1996; (2) Ira N. Levine, Molecular Spectroscopy, Wiley: New York, 1975; valamint szakkikkek speciális témakörökből. Ajánlott irodalom: (1) Walter S. Struve, Fundamentals of Molecular Spectroscopy, Wiley: New York, 1989; (2) Gerhard Herzberg, Molekulaszínképek és molekulaszervezet II., Akadémiai Kiadó: Budapest, 1959.

KÉM/8 Molekulamozgások kvantummechanikája

[Császár Attila](#) — [CSAKABT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető

Impulzusmomentum algebra. Szimmetria: túl a pontcsoportokon. Impulzusmomentumok csatolása. Merev rotátor energiaszintjei és hullámfüggvényei. Elterések a merev rotátor modelltől. Ab initio forgási spektroszkópia. Az SQM

EÖTVÖS LORÁND TUDOMÁNYEGYETEM - TERMÉSZETTUDOMÁNYI KAR
KÉMIA DOKTORI ISKOLA KÉPZÉSI TERVE

módszer és a kvadratikus erőterek. Anharmonikus oszcillátorok, anharmonikus erőterek kvantumkémiailag meghatározása. Ven Vleck perturbációs számítás. Teljes rezgési-forgási szinképek variációs alapú számítása. Modell Hamilton operátorok. MARVEL: modell Hamilton operátor nélküli spektroszkópia. Lokális rezgési módusok elmélete és gyakorlata. Normál koordinátákon alapuló rezgési-forgási spektroszkópia. Kötelező irodalom: (1) Phil R. Bunker, Per Jensen, Molecular Symmetry and Spectroscopy, 2nd ed., NRC: Ottawa, 1998; (2) Harry W. Kroto, Molecular Rotation Spectra, Wiley: London, 1975; (3) E. Bright Wilson, Jr., J. C. Decius, Paul C. Cross, Molecular Vibrations: The Theory of Infrared and Raman Vibrational Spectra, Dover: New York, 1982; valamint szakcikkek speciális témakörökből. Ajánlott irodalom: (1) Gerhard Herzberg, Molekulaszinképek és molekulaszervezet II., Akadémiai Kiadó: Budapest, 1959.

KÉM/9 Kolloidális gyógyszerhordozók stabilitása

[Csempesz Ferenc – CSFKAAT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető

A hatóanyag megfelelő támadáspontokra történő eljuttatásával összefüggő bonyolult fizikai, kémiai és határfelületi folyamatok szabályozása kolloidokkal megkülönböztetett jelentőségű a gyógyszerterápia optimalizálása szempontjából. Szabályozott hatóanyag szállítás és leadás elvi alapjai. Kolloid diszperz rendszerek stabilitása. Intermolekuláris és interpartikuláris kölcsönhatások kolloid rendszerekben. Farmakon hordozók jellemzése: méret, méreteloszlás, felületi tulajdonságok, határfelületek elektromos sajátságai. Mikrofázisok, nanorészecskék gyógyszerészeti alkalmazásokban. A hatóanyag megkötődése (szorpció, beépülés) hordozókon. Határfelületi kompetitív folyamatok törvényszerűségei. Polimer alapú hordozók stabilitása (biodegradálható és nem lebontható polimerek). Emulziók (mikroemulziók, gyógyszerészeti emulziók). Stabilizálás elvi lehetőségei és gyakorlata. Liposzómák, nioszómák fizikai stabilitása, alkalmazásai. Ajánlott irodalom: Rácz I, Selmeczi B.: Gyógyszer technológia I-III (egyetemi tankönyv), választott részek, Medicina, Budapest, 2001; J. Kreuter: Colloidal Drug Delivery Systems, Marcel Dekker Inc., New York, 1994.

KÉM/10 Makromolekulák határfelületi viselkedése

[Csempesz Ferenc – CSFKAAT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető

Természetes eredetű és szintetikus makromolekulás vegyületek. Makromolekulák kémiai szerkezete, vázszerkezete. Makromolekulás oldatok képződésének termodinamikai alapjai. Makromolekulák határfelületi felhalmozódása: termodinamikai hajtóerő, az adszorpció kinetikája. Egyensúlyi adszorpció: határfelületi többletek, adszorpciós izotermák. A polimer adszorpció elméletei. Határfelületi polimerretek szerkezete, adszorbeált makromolekulák konformációja. Szegmens térbeli eloszlása, felülethez kötött szegmenshányad, az adszorpciós réteg vastagsága. Polimer adszorpciós rétegek szerkezetvizsgálatának kísérleti módszerei. Makromolekulák kompetitív adszorpciója. Egyadszorpciós izotermák, a preferenciális adszorpció jellemzése. Kiszorításos (displacement) adszorpció. Makromolekulák határfelületi rétegek szterikus kölcsönhatásai. Hídkötéses, ozmotikus és szelektív flokkuláltatás, szterikus stabilizálás. Ajánlott irodalom: G.J. Fleer et al.: Polymers at Interfaces, Chapman & Hall, London, 1993.; Bárány S.: Polimerek diszperz rendszerekben, Akadémiai Kiadó, Budapest, 2000.

KÉM/11 Elektromigrációs módszerek

[Dibó Gábor – DIGKAAT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető

Az elektroforézis elmélete. Kapillár-elektroforézis. Réteg-kromatográfiai módszerek

elmélete és gyakorlata. Királis elválasztás.

KÉM/12 Kvantumkémiail molekulamodellezés

[Farkas Ödön – FAOKAAT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételhető

Kvantumkémiail számítások elvégzésével megoldható problémák, a kapott eredmények várható pontosságával. Az extrapolációs kvantumkémiail módszerek (G2, G3, ONIOM, stb.). A számítások elvégzésekor gyakran előforduló nehézségek, számítási feladatok megtervezése és elvégzése. A potenciális-energia felületek topológiai tulajdonságai. A geometriaoptimalás és trajektóriaszámítások eszköztára, elmélete. Átmeneti állapotok számítása. Oldószer-hatás figyelembevétele. A Gaussian 03 és a GaussView programok használata. Kötelező irodalom: http://organ.chem.elte.hu/farkas/teach/Q_spec/q_spec.html Ajánlott irodalom: Szakcikkek a témában

KÉM/13 Folyadékkristályok

[Fodor-Csorba Katalin – FOKNAAT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételhető

Mi a folyadékkristály? Alapfogalmak ismertetése. Termotróp folyadékkristályok és mezofázisaik. Hogyan tervezzünk nematikus ill. szmektikus folyadékkristály molekulát? Homológ sorokban megfigyelhető jellemző tulajdonságok. A kiralitás fontossága a ferroelektromos tulajdonság megjelenésében és ezen anyagok viselkedése elektromos térben. Deutérium izotóp jelzés kialakítása lineáris törzsű molekulákban és az izotóp jelzés fontossága a mezofázisok megértésében (2H NMR spektroszkópia). Hajlott törzsű, azaz banán alakú folyadékkristályok előállítása és mezofázisaik összehasonlítása lineáris törzsű molekulákkal. Liotróp rendszerek. Polimer folyadékkristályok és tulajdonságaik. Mezofázisok meghatározása polarizációs optikai mikroszkóp, differencial scanning kalorimetria és röntgenkrisztallográfia segítségével. Folyadékkristályok a gyakorlatban (kijelzők mátrix anyagai, egyéb kémiai hasznosításuk). Kötelező irodalom: Bata Lajos: Folyadékkristályok, Műszaki könyvkiadó, Budapest, 1986; B. Bahadur Liquid Crystals, Application and uses Vol. I-III. World Scientific, Singapore, 1991.; Collings, M. Hird: Introduction to Liquid Crystals, Taylor and Frances, Philadelphia, 1998. Ajánlott irodalom: Fodor-Csorba K. Bata L., Holly S., Gácsné Baitz E., Újszászy K.: Stabil izotóppal jelzett folyadékkristályok előállítása és vizsgálata I. 4-n-Heptil-difenil-karbonsav-d12 előállítása. I. Magyar Kémiai Folyóirat, 104, (9) 349-353 (1998).; Fodor-Csorba K., G. Galli, C.A. Veracini, D. Catalano, Bata L., Holly S., Gács-Baitz E.: Stabil izotóppal jelzett termotróp folyadékkristályok előállítása és vizsgálata II., Magyar Kémiai Folyóirat, 105, 505-511 (1999); Mátyus E., Fodor-Csorba K., Jákli A: A folyadékkristály-kutatás új irányvonala: banán alakú folyadékkristályok. Összefoglaló közlemény, Magyar Kémiai Folyóirat, 107. 227-234 (2001).

KÉM/14 Számítógépes kémia

[Fogarasi Géza – FOGKAAT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételhető

Főbb fejezetek: Molekuláris hiperfelületek. Molekulamechanika. A kvantumkémiail módszerek áttekintése. Hullámfüggvény-analízis. Az elektronszerkezet kvalitatív elméletei. Relativisztikus módszerek. Az átmenetiállapot-elmélet és a statisztikus mechanika. Minimumkeresés. Szimulációk, időfüggő módszerek és szolvatációs modellek. Ezekhez csatlakozik egy számítógépi gyakorlat is, melynek során a hallgatók kereskedelmi programokkal maguk végeznek konkrét számításokat. Irodalom: Frank Jensen: Introduction to Computational Chemistry, Wiley, Chichester, 1999.

KÉM/15 Elektromos kölcsönhatás kolloid rendszerekben

[Gilányi Tibor – GITKAAT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető

A határfelületek elektromos szerkezete: Helmholtz modell, Gouy-Chapman elmélet, Stern-féle modell. Folytonos és diszkrét szemléletű leírások .Elektrokinetikai jelenségek. Az elektrokinetikai potenciál elmélete. A pH-meghatározás problémája kolloid és biológiai rendszerekben. A szuszpenziós potenciál. A Donnan-egyensúly különböző értelmezései. Ionok adszorpciója. Adszorpciós izoterma-egyenletek. Kölcsönhatás ionos tenzidek oldataiban: micellaképződés, keverékmicella-képződés, polimer-tenzid komplexképződés. Ajánlott irodalom: R. J. Hunter: Foundation of Colloid Science, Clarendon Press, Oxford, 1993.

KÉM/16 Tenzidek önszerveződése oldatban

[Gilányi Tibor – GITKAAT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető

A tenzidoldatok fizikai-kémiai tulajdonságai. A "hidrofób kölcsönhatás", az amfipatikus szerkezetű molekulák önszerveződésének hajtóereje. A micellaképződés klasszikus elméletei. Tömehatás modell. Pszeudo-fázisszeparációs modell. A tenzidaggregáció kis rendszerek termodinamikai elmélete. A micellaképződés fluktuációs elmélete. Ionos micellák képződése. Az ellenion-disszociációfok problémája. A tömehatás modell módosítása az ionos micellák képződésének leírására. Az ionok eloszlása makroionokat tartalmazó rendszerekben. Tenzidaggregáció többkomponensű rendszerekben. Keverék-micellák képződése. Szolubilizáció. Ionos tenzidek kollektív kölcsönhatása nemionos polimerekkel. Termodinamikai modellek. Polielektrolit – tenzid kölcsönhatás. Vizsgálati módszerek. Tenzidion-aktivitás mérés ionszelektív elektródokkal. Nyomelektrolit szennyezéses módszer. A sztatikus és dinamikus fényszóródás alkalmazása. Kötelező irodalom: szakkikkek speciális témakörökből. Ajánlott irodalom: R. J. Hunter: Foundation of Colloid Science, Clarendon Press, Oxford, 1993.

KÉM/17 Gyűrűzáródási reakciók

[Hajós György – HAGMAAE.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető

A perieikus reakciók osztályozása és értelmezése kvalitatív molekulapálya-elmélet segítségével. A 2-, 4- és 6-elektronos elektrociklizációs reakciók, a szimmetria megmaradásának tétele. A 2+2 cikloaddíciók megvalósulásának lehetősége. Karbén reakciója olefinekkel. Gyökös 2+2 cikloaddíciók. Diels-Alder regioszelektivitása, a reakciópartner energiagénye. Intramolekuláris Diels-Alder reakciók. Szigmatróp átrendeződések értelmezése és megvalósítási lehetősége. A [3+3] szigmatróp átrendeződések sztereokémiai lefutása. Magasabb rendű szigmatróp átrendeződések. Általános gyűrűzárási elvek, szintetikus megvalósítások: A termikus syn-elimináció. Baldwin-féle gyűrűzárási szabályok és értelmezésük. Kötelező irodalom: az előadások során kiadott publikációk megértése és ismertetése. Ajánlott irodalom: F. A. Carey and R. J. Sundberg: Advanced Organic Chemistry, Plenum Press, New York, 1990.

KÉM/18 Heteroaromás vegyületek kémiája

[Hajós György – HAGMAAE.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető

A heteroaromaticitás fogalma, elektronhiányos és elektrontöbblettel rendelkező gyűrűrendszerek összehasonlítása. Pirazolok, diazolok, valamint oxigént és ként tartalmazó azolok és benzológiák szintézise. Az öttagú heteroaromás rendszerek reakciókészsége. Piridin és benzológiájainak szintézis-lehetőségei, különös tekintettel a modern módszerekre. Diazinok és benzológiájuk előállításuk. A hattagú heteroaromás rendszerek reakciókészsége. Hídfő-nitrogént tartalmazó kondenzált gyűrűrendszerek

EÖTVÖS LORÁND TUDOMÁNYEGYETEM - TERMÉSZETTUDOMÁNYI KAR
KÉMIA DOKTORI ISKOLA KÉPZÉSI TERVE

előállítás és reaktivitása. Ikerionos rendszerek: szintézis és továbbalakítás. Kis- (3- és 4-tagú) és nagygyűrűs (7-tagú) heteroaromás vázak. A heterociklusok nomenklaturájának alapjai. Kötelező irodalom: az előadások során kiadott publikációk megértése és ismertetése. Ajánlott irodalom: J. A. Joule, K. Mills, G. F. Smith: Heterocyclic Chemistry, Chapman and Hall, London, 3rd ed., 1995.

KÉM/19 Szénhidrátok kémiája haladóknak / Biomolekuláris kémia

[Hollósi Miklós – HOMKABT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételt

Az élet molekuláris tervrajza. Biokémiai reakciók, kofaktorok és transzport molekulák. Fehérjék, enzimek. Nukleinsavak kémiája, a DNS és RNS építőkövei, valamint szerkezete. A DNS és RNS biológiai szerepe, átírás, fordítás. Fehérjék célbajuttatása. Rekombináns DNS technika. Membráncsatornák és pumpák, jelátvitel. Evolúciókutatás, bioinformatika. Kötelező irodalom: M. Hollósi., L. Laczkó, B. Asbóth: Biomolekuláris kémia I, Nemzeti Tankönyvkiadó, Budapest, 2005; M. Hollósi., B. Asbóth: Biomolekuláris kémia II, Nemzeti Tankönyvkiadó, Budapest, 2007. Ajánlott irodalom: J.M. Berg., J.L. Tymoczko, L. Stryer: Biochemistry, Fifth edition, W.H. Freeman and Co., New York, 2002.

KÉM/20 Sztereo-kémia és kiroptikai spektroszkópia

[Hollósi Miklós – HOMKABT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételt

Sztereo-kémiai alapfogalmak. Sztereoizomerek. Szimmetria. Konfiguráció és konformáció. Sztereoizomerek elválasztása (rezolválás, racemizálás). Heterotóp ligandumok és térfélek. Kiroptikai spektroszkópia. Alkalmazott CD-spektroszkópia. Biopolimerek, CD-spektroszkópiai vizsgálatok. Vibrációs optikai aktivitás. Kötelező irodalom: Hollósi, M., Laczkó, I., Majer, Zs.: A sztereo-kémia és kiroptikai spektroszkópia alapjai, Nemzeti Tankönyvkiadó, Budapest, 2004. Ajánlott irodalom: Perczel, A., Laczkó, I, Hollósi, M.: Peptidek térszerkezet-vizsgálata A kémia újabb eredményei, Akadémiai Kiadó, Budapest, 1994.; E.L.Eliel, S.H.Wilen, L.M. Mander: Stereochemistry of Organic Compounds, Wiley, 1994.

KÉM/21 Zöld kémia

[Horváth István Tamás – HOIKADT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételt

Noha a kémia meghatározó szerepet játszik mindennapi életünkben, a kémia pozitív szerepének elismerése észrevehetően csökkent az elmúlt évtizedben. Ez a különböző, kémiai eredetű környezeti problémákra vezethető vissza. A zöld kémia egy olyan új területe a kémiának, amely már a kutatási és fejlesztési feladatok kitűzésekor figyelembe veszi a jövő termékeinek és az azokat előállító technológiáknak környezeti szerepét. A speciális kollégium célja a zöld kémia alapjainak és alkalmazásának bemutatása: 1.A zöld kémia kialakulása és alapelvei 2. Szintézismódszerek toxikus vegyületek nélkül 3.A klór alkalmazása körüli vita 4.Toxikus nehézfém-ionok kezelése 5.Termék(ek)től könnyen elválasztható reagensek és katalizátorok 6.Zöld elválasztási módszerek 7.Szintézis oldószerek nélkül 8.Biokatalízis és biosokféleség (biodiversity) 9.A sztereo-kémia szerepe a zöld kémiában 10.Növényvédőszer 11.Anyagok a környezeti szempontokat figyelembe vevő versenyképes gazdaságban 12.A tartós használat kémiája 13.Az újrafelhasználás kémiája 14.Az energiaellátás környezetkémiai vonatkozásai 15.A népességnövekedés környezetkémiai vonatkozásai 16.Környezeti szempontok a versenyképes gazdálkodásban Kötelező irodalom: Barta, K.; Csékei, M.; Csihony, S.; Mehdi, H.; Horváth, I. T.; Pusztai, Z.; Vlád, G.: A zöld kémia tizenkét alapelve, Magyar Kémikusok Lapja 2000, 55, 173. Ajánlott irodalom: Anastas, P. T.; Warner, J. C.: Green Chemistry: Theory and Practice, Oxford University Press, Oxford, 1998.

KÉM/22 Ciklodextrinek kémiája

[Horváthné Otta Klára – HOKKAAT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető

A ciklodextrinek szerkezete, osztályozása. Ciklodextrinek előállítása. Ciklodextrin komplexek. Ciklodextrinek alkalmazásai.

KÉM/23 Biokonjugátumok

[Hudecz Ferenc – HUFLAAT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető

Az előadás-sorozat tematikája megismerteti a hallgatókkal a biokonjugátumok fogalmát, e multidiszciplináris tudományterület forrásvidékét. Funkciós csoportok, kapcsolási technikák, biokonjugátumok szintézisére. A szintézis speciális szempontjai. Biokonjugátumok tisztítása: módszerek és gyakorlat. Biokonjugátumok analitikájában alkalmazható módszerek: elemzés, előnyök, hátrányok. A szerkezetvizsgálat különleges nehézségei és a megoldás lehetőségei. Felhasználás: legújabb eredmények, esettanulmányok: a biokonjugátumok alkalmazása az elválasztástechnikában, a biokémia, a biofizika, az immunológia, a sejtbiológia, sz orvosbiológia (hatásmechanizmus kutatás, diagnosztika), valamint a farmakológia (hatóanyagok célbajuttatása, "controlled release") terén. Az előadások érdeklődésre tarthatnak számot kémiai, biológia, biokémiai, molekuláris orvosbiológiai, gyógyszerészeti PhD hallgatók körében. Kötelező irodalom: S. S. Wong: Chemistry of protein conjugation and cross-linking, CRC Press 1999.; G. T. Hermanson: Bioconjugate techniques, Academic Press, 1996.; C. M. Niemeyer: Bioconjugation Protocols: Strategies and Methods (Methods in Molecular Biology), Humana Press, 2004. Ajánlott irodalom: P. Krogsgaard-Larsen, T. Liljefors and U. Madsen: Textbook of Drug Design and Discovery 3rd Edition, Taylor and Frances, 2002.

KÉM/24 Válogatott fejezetek a peptid- és fehérjekémiából

[Hudecz Ferenc – HUFLAAT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető

Az előadás-sorozat megismerteti a hallgatókkal a korszerű peptid- és fehérjekémia egyes aktuális kérdéseit. Az előadások egymáshoz csupán lazán kapcsolódnak és önmagukban is megérthetőek. Közös jellemzőjük a szerkezeti (kémiai) szempontu megközelítés. Ciklopeptidek. Lipopeptidek szintézise. Jelzett peptidek szintézise. Peptidanalógok a szerkezet-hatás összefüggések vizsgálatában. Bevezetés a proteomikába. Proteázok és proteáz gátlók a gyógyszerkutatásban. Mátrix metalloproteinázok szerkeze és biológiai funkciói. Proteinek antigénszerkezete. Peptid epitopok és szintetikus antigének. Membránfehérjék kromatográfiája. Fehérjék posz-transzlációs módosításai. Mucin glikoproteinek. Célbajuttató peptidek és alkalmazásuk tumorsejtek célzott terápiájában. Scavenger receptorok: szerkezet és funkció. Az előadások érdeklődésre tarthatnak számot mind a szintetikus, mind az analitikai problémák iránt érdeklődőknek, és valószínűsíthető a határterületeken dolgozó (biokémia, biofizika, immunológia) PhD hallgatók érdeklődése is. Kötelező irodalom: R. L. Lundblad: The Evolution from Protein Chemistry to Proteomics. CRC Press, 2006.; S. Doonan: Peptides and Proteins, Royal Society of Chemistry, London, UK, 2002. ; A témakörökhöz kapcsolódó szakcikkek. Ajánlott irodalom: Gabriel Waksman (Ed.): Proteomics and Protein-Protein Interactions: Biology, Chemistry, Bioinformatics, and Drug Design, Springer-Verlag New York, 2005.

KÉM/25 Az elektrokémia története

[Inzelt György – INGKAAT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető

Az elektrokémia születése. Korai értelmezési problémák (a Volta-féle fizikai és a Nernst-féle kémiai modell). Faraday. Az elektrokémia termodinamikai

EÖTVÖS LORÁND TUDOMÁNYEGYETEM - TERMÉSZETTUDOMÁNYI KAR
KÉMIA DOKTORI ISKOLA KÉPZÉSI TERVE

megalapozása (Gibbs). Az elektrokémiai kettős réteg modellek változása az idők folyamán. A korai galvancelláktól a lítiumion-elemekig. A tüzelőanyag-cellák története. Az elektródfolyamatok kinetikájának megértése (Tafel, Erdey-Grúz-Volmer, Polányi, Marcus). A Grotthus-féle elképzelés és a prototróp vezetés. A nernsti oldástenziótól a hidegfúzóig. Einstein és az ozmózis nyomás. Az elektrokémiai kísérleti technikák fejlődésének elméleti és gyakorlati hatása. Kötelező irodalom: Inzelt Gy.: Az elektrokémia korszerű elmélete és módszerei II., Nemzeti Tankönyvkiadó, 1999.; valamint szakcikkek speciális témakörökből. Ajánlott irodalom: Inzelt György: Kalandozások a kémia múltjában és jelenében (Kémiai esszék), Vince Kiadó, Budapest, 2003.; Inzelt György: Vegykonyhájában szintén megteszi. A kémiáról és más dolgokról, Akadémiai Kiadó, 2006.

KÉM/26 Elméleti elektrokémia

[Inzelt György – INGKAAT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető

A standard potenciál problémája. Korszerű elektrokémiai vizsgálati technikák (tranzien্স módszerek, elektrokémiai impedancia-spektroszkópia). Kombinált módszerek (elektrokémiai piezoelektromos nanogravimetria, spektroelektrokémia, atomi mikroszkópiák, ellipszometria, lézersugár elhajlás, szonoelektrokémia). Elektrokatalízis. Fotoelektrokémia. Szilárd fázisú elektrokémia. Periódikus és kaotikus jelenségek. Polimerfilm elektródok (redoxi és elektronvezető polimerek, sokmagvú szervesetlen polimerek, kompozitok). Elektrokémiai technológiák. A lítium-és tüzelőanyag-elemek Az elektrokémia a környezetvédelemért. Elektrokémiai érzékelők és bioszenzorok. Kötelező irodalom: Inzelt Gy.: Az elektrokémia korszerű elmélete és módszerei I-II., Nemzeti Tankönyvkiadó, 1999.; valamint szakcikkek speciális témakörökből. Ajánlott irodalom: Erdey-Grúz T.: Elektródfolyamatok kinetikája, Tankönyvkiadó, 1969.; A.J. Bard, L.R. Faulkner: Electrochemical Methods, Wiley, 2000.; Electroanalytical Methods (ed. F. Scholz), Springer, 2002.

KÉM/27 Makromolekuláris kémiai technológia alapjai

[Iván Béla – IVBLAAT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető

A polimerek szerepe a gazdaságban és a mindennapi életben. Az alapvető polimerizációs eljárások: láncpolimerizáció és lépcsős polimerizáció. A láncpolimerizáció különböző mechanizmusokkal: gyökös polimerizáció, anionos polimerizáció, kationos polimerizáció, koordinatív polimerizáció (olefinek polimerizációja Ziegler-Natta katalizátorokkal), csoporttanszfer polimerizáció, metatézis polimerizáció. A legfontosabb lépcsős polimerizációs folyamatok, kondenzációs melléktermékkel (polikondenzáció) és anélkül. A polimerizációs technológiák: tömbpolimerizáció, gázfázisú polimerizáció, oldószeres polimerizáció, szuszpenziós polimerizáció, emulziós polimerizáció. A leggyakrabban alkalmazott polimerek: polietilén, polipropilén, poli(vinil-klorid), polisztirol, poli(met)akrilátok, polikarbonátok, poliészterek, poliuretánok, poliamidok, poliepoxiok. A polimerek feldolgozása műanyagokká, a legfontosabb feldolgozási eljárások. A műanyagok környezeti vonatkozásai. Ajánlott irodalom: Farkas Ferenc: A műanyagok és a környezet, Akadémiai Kiadó, 2001.

KÉM/28 Principles of molecular engineering of macromolecules

[Iván Béla – IVBLAAT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető

Polymer age. The fundamental aspects of polymerization processes: chain polymerizations and step-growth polymerizations. The molecular weight distributions (MWD) of polymers. The analysis techniques of MWD of polymers on the basis of physical chemistry of polymer solutions: viscosity, osmotic pressure,

EÖTVÖS LORÁND TUDOMÁNYEGYETEM - TERMÉSZETTUDOMÁNYI KAR
KÉMIA DOKTORI ISKOLA KÉPZÉSI TERVE

light scattering, ultracentrifugation and size exclusion chromatography. Kinetics of polymerizations. Living and quasiling polymerizations: tools for the preparation of well-defined macromolecules (molecular engineering). Nonlinear polymer chains: synthesis, analyses, structure and fundamental physical properties. Graft, star, ladder, cross-linked and hyperbranched polymers and dendrimers and their applications. Ajánlott irodalom: George Odian: Principles of Polymerization, Wiley, New York, 2004.; valamint szakcikkék speciális témakörökből.

KÉM/29 Szerves kémia haladóknak

[Jalovszky István – JAIKABT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételt

Hatékony reakciók szén-szén kötés kialakítására: Michael-addíció és aldol-addíció kombinált alkalmazása bonyolult szerkezetű vegyületek előállítására. Enaminok szintetikus felhasználása. Darzens-reakció alkalmazása. Karbonilvegyületek lánchosszabbítása. Gyűrűanellációs reakciók. Funkciós csoportok átalakítása: nitrovegyületek és salétromossav-észterek alkalmazása szintézisekben. Nitril-oxidok generálása és szintetikus felhasználása. Alifás polinitro-vegyületek előállítása és reakciói. Cikloaddíciók. Retroszintetikus analízis. Tankönyvből jól ismert reakciók szintetikus alkalmazása során tapasztalt meglepő, illetve a tanultakkal ellentmondó kísérleti tények (szakcikkék alapján). Ajánlott irodalom: Richard C. Larock: Comprehensive Organic Transformations (VCH, ISBN: 3-527-26953-3)

KÉM/30 Enantiomerek elválasztása kromatográfiai technikákkal

[Juvancz Zoltán – JUZMACT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételt

Enantiomerek definíciója, főbb típusai. Szilárd és mozgó fázis kölcsönhatása. Enantiomer megkülönböztetés. Királis GC. Királis kapillár-elektroforézis. Királis HPLC.

KÉM/31 Röntgendiffrakció, új irányzatok

[Kálmán Alajos – KAAMAAT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételt

A röntgendiffrakció elméleti alapjai. Kristálytani alapismeretek. Polimorfizmus. Egykristály diffrakció. Pordiffrakció. Fehérje röntgen kristallográfia.

KÉM/32A neurokémia alapjai

[Kardos Julianna – EHA.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételt

A kémiai jelátvitel alapjai (idegsejt, glia, szinapszis, receptor); A szinapszis jellemzése; A kémiai hírvivő molekulák osztályozása; Az idegsejt jelátviteli rendszereinek áttekintése; Transzporterek, pumpák és ioncsatornák; G proteinnel szabályozott jelátvitel; Calcium ion-függő jelátvitel; Az érzékelés receptorai; Neurotranszmitterek: acetilkolin; Neurotranszmitterek: aminosavak; Neurotranszmitterek: monoamin- és purin származékok; Neurotranszmitterek: neuropeptidok; Neurotranszmitter receptorok és transzporterek kötődési és funkcionális vizsgálata; Neuronális plaszticitás: tanulás és memória; Az epilepszia neurokémiai folyamatai; Az agyi infarktus neurokémiai folyamatai.

KÉM/33 Alkalmazott statisztikai módszerek

[Keszei Ernő – KEEKAAT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételt

Véletlen kísérletek, valószínűségi változók. A valószínűségszámítás axiómái. Várható értékek és tulajdonságaik. Sztochasztikus konvergencia. Nagy számok törvényei. Valószínűségi eloszlások jellemzése. Fontosabb eloszlások tulajdonságai. A statisztikai vizsgálatok célja. Sokaság és minta. Mintavételi módszerek. Minták

jellemzése. Mintastatisztikák. Sokaság várható értékei és mintastatisztikák közti hasonlóságok és különbségek. Becslési módszerek: maximum likelihood, legkisebb négyzetek módszere, momentumok módszere. Becslőfüggvények tulajdonságai. Konfidencia intervallumok. Statisztikai próbák. Két várható érték összehasonlítása. Több várható érték összehasonlítása (variancia-analízis módszerek). Szórásnégyzetek összehasonlítása. Statisztikai modellek. Lineáris és nemlineáris paraméterbecslés. Az illeszkedés jóságának vizsgálata. Implicit regresszió. Numerikus paraméterbecslő eljárások. Kitekintés a többváltozós módszerek alkalmazására. Kötelező irodalom: Reimann-Tóth: Valószínűségszámítás és matematikai statisztika, Tankönyvkiadó, 1989. Ajánlott irodalom: J. R. Green, D. Margerison: Statistical Treatment of Experimental Data, Elsevier, 1978.; William Feller: An Introduction to Probability Theory and its Application, John Wiley, 1971.; W. H. Press és mások: Numerical Recipes, The Art of Scientific Computing, Cambridge University Press, 1986.; C. Chatfield, A. J. Collins: Introduction to Multivariate Analysis, Chapman and Hall, 1980

KÉM/34 Modern reakciókinetika

[Keszei Ernő – KEEKAAT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételt

Kémiai reakciók molekuláris értelmezése. Reakció-potenciálfelületek. Az átmenetiállapot-elmélet kváziegyensúlyi és dinamikai leírása. Reakciódinamika: kísérletek és elmélet. Unimolekulás reakciók elmélete. Bonyolult reakciómechanizmusok analitikus és numerikus megoldása. A kvázistacionárius megoldások hibája. Nagyszámú elemi lépést tartalmazó mechanizmusok redukciója. Oldatreakciók leírása. Ionos és poláros átmeneti komplexek viselkedése poláros oldószerben. Kinetikai sóhatás. Diffúziókontrollált reakciók homogén kinetikája. Izotópeffektusok. Lineáris szabadenergia függvények és egyéb félkvantitatív összefüggések. Enzimreakciók kinetikája. Zsúfolt rendszerek kinetikája in vitro és in vivo. Sav-bázis katalízis általános leírása. Kísérleti módszerek a reakciókinetikában, különös tekintettel a nanoszekundum-femtosekundum időskálára. Fotokémia és sugárkémia. Az átmeneti komplex kísérleti megfigyelése. Kinetikai eredmények numerikus kiértékelése. Nemlineáris kémiai dinamikai rendszerek. Oszcilláló reakciók. Kémiai káosz. Kötelező irodalom: M. J. Pilling, P. W. Seakins: Reakciókinetika, Budapest, 1997. Ajánlott irodalom: P. W. Atkins: Fizikai Kémia, Nemzeti Tankönyvkiadó, Budapest, 2002.; M. Brouard: Reaction Dynamics, Oxford Science Publications, 1998

KÉM/35 Bioanyagok felületkémiaja

[Kiss Éva – KIEKABT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételt

Biokompatibilitás és felületi biokompatibilitás. „Idegen anyagok” az élő szervezetben. Felületmódosítási koncepciók. A felületi biokompatibilitás tanulmányozásának és javításának lehetőségei. Felületanalitikai és felületvizsgálati módszerek (XPS, optikai spektroszkópiák, nedvesedésmérés, pásztázó tűszondás módszerek, hullámvezető és reflexiós módszerek). A polimer bioanyag és a biológiai közeg (modellek) kölcsönhatásának jellemzése. A fehérje adszorpció kiemelkedő szerepe. A polimer felület dinamikája. A polimer felület módosításának legújabb (kémiai és plazmakezeléses) módszerei. Kötelező irodalom: Válogatott fejezetek a J. Andrade (Ed.) Surface and Interfacial Aspects of Biomedical Polymers, vol 1-2. Plenum Press, N.Y. könyvből, A terület friss közleményeinek feldolgozása ajánlott körből. Ajánlott irodalom: B.D. Ratner, A.S. Hoffman, F. J. Schoen, J. E. Lemons (Eds.): Biomaterials science, Ac. Pr. San Diego, 1996. válogatott fejezetei.; Kiss É.: Kardiovaszkuláris anyagok, Sz.: Bertóti I., Marosi gy., Tóth A. Műszaki felülettudomány és orvosbiológiai alkalmazásai B+V Kiadó, Budapest, 2003.

KÉM/36 Szilárd / folyadék határfelületi jelenségek, nanorétegek

[Kiss Éva – KIEKABT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető

A szilárd/folyadék adhézió. Mérési lehetőségek, korlátok. A peremszögmérés korszerű eszközei, értékelési, feldolgozási módszerek. Adszorpció szilárd felületen, oldatból. A polimer adszorpció jellegzetességei, polielektrolitok, LbL rendszerek kialakítása és alkalmazása. A fehérje adszorpció jellemzése, reverzibilitás, réteg szerkezet, kompetíció, Vroman-hatás. Önrendeződő nanorétegek szilárd felületen. Kémiai felépítés, jellemzés, szerkezetvizsgálat. Langmuir és Langmuir-Blodgett rétegek előállítása, tulajdonságai és alkalmazása. SA és LB rétegek összehasonlítása kémiai felépítés, stabilitás és felhasználhatóság szerint. Kötelező irodalom: Kiss É.: Langmuir-Blodgett-filmek, Akadémiai kiadó, Budapest, 2006.; A terület friss közleményeinek feldolgozása. Ajánlott irodalom: M. Malmsten: Biopolymers at interfaces, Marcel Dekker, New York, 2003.

KÉM/37 Fémek elektrokémiája és korróziója haladóknak

[Kiss László – KILMAAE.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető

Elektrokémiai alapjelenségek. Fémfelületek egyensúlyi folyamatai. Galvani potenciál. Aktivitás. Korrózió. Korrózióvédelem.

KÉM/38 Főcsoportbeli elemek fémorganikus kémiája

[Knausz Dezső – EHA.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető

Szilíciumorganikus vegyületek szerkezete, szintézise, reaktivitása. Szilíciumorganikus vegyületek kémiai alkalmazásai. Származékképzési reakciók.

KÉM/39 Fémorganikus vegyületek a szerves szintézisben

[Kotschy András – KOAKACT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető

Fémorganikus kémiai alapfogalmak, a katalízis alapjai, olefinok hidrogénezése, aszimmetrikus hidrogénezés, hidroformilezési reakciók, hidroaminálás, aminokarbonilezés, alkoxikarbonilezés, dekarbonilezés, keresztkapcsolási reakciók, allilkomplexek reakciói, metatézis. Kötelező irodalom: Faigl F., Kollár L., Kotschy A., Szepes L. Szerves fémvegyületek kémiája, Nemzeti Tankönyvkiadó, Budapest, 2001; Ajánlott irodalom: A. Kotschy, G. Timári, Heterocycles from Transition Metal Catalysis, Springer, 2005.

KÉM/40 Modern szintézismódszerek

[Kotschy András – KOAKACT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető

Biokatalízis, szuperkritikus oldószerek alkalmazása, kombinatorikus kémia, fotokémia, átrendeződési reakciók, keresztkapcsolási reakciók, metatézis, szintézisek alternatív oldószerekben (ionos folyadékok, fluoros oldószerek) Kötelező irodalom*: Faigl F., Kollár L., Kotschy A., Szepes L. Szerves fémvegyületek kémiája, Nemzeti Tankönyvkiadó, Budapest, 2001; Ajánlott irodalom: A. Kotschy, G. Timári, Heterocycles from Transition Metal Catalysis, Springer, 2005

KÉM/41 Elektrokémiai kísérleti módszerek elméleti háttere

[Láng Győző – LAGKAAT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető

A modern kísérleti elektrokémia módszerei. Elektrokémiai cellák, és azok típusai. Irányítás (vezérlés és szabályozás), adatgyűjtés. Az egyenáramú módszerek elméleti alapjai (a sebességhatározó részlépés: töltésátlépés, diffúzió, migráció, konvektív diffúzió). A forgó korongelektrod. Tranziens módszerek. Lineáris

EÖTVÖS LORÁND TUDOMÁNYEGYETEM - TERMÉSZETTUDOMÁNYI KAR
KÉMIA DOKTORI ISKOLA KÉPZÉSI TERVE

rendszerek tulajdonságai. Az impedancia-spektroszkópia elméleti háttere és módszerei. A frekvenciaválasz-analizátorok és LCR mérők működéséről. A szinuszhullám korreláció. A Kramers-Krönig transformáció. Az impedancia-spektrumok feldolgozása komplex nemlineáris illesztéssel. A kvarckristály mikromérleg (nanomérleg) működésének elméleti alapjai. Szilárd elektródok felületi energetikája, felületi feszültségük változása az elektródpotenciállal. A felületi energia változásának mérési módszerei. A „bending beam” módszer és az elektrokémiai Kösters-lézerinterferométer elve. Ajánlott irodalom: A releváns fejezetek az alábbi szakkönyvekből: Szalma József, Láng Győző, Péter László: Alapvető fizikai kémiai mérések és a kísérleti adatok feldolgozása, Eötvös Kiadó, 2007.; A.J. Bard, L.R. Faulkner: Electrochemical Methods, Wiley, 2000.; Inzelt György: Az elektrokémia korszerű elmélete és módszerei, I. - II., Budapest, 1999.; R. J. Macdonald: Impedance Spectroscopy, New York, 1987.; Horányi György, Láng Győző: Zsákutcák, tévutak és csapdák a jelenkori elektrokémia elméletében és kutatásában (A kémia újabb eredményei 90), Akadémiai Kiadó, Budapest, 2001.; R.P. Wayne: Chemical Instrumentation, Oxford, 1995.

KÉM/42 Bevezetés az elemi reakciók kinetikájának elméletébe

[Lendvai György – LEGMAAE.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető

A reakciókinetika alapjai. Molekularitás. Ütközési elmélet. Sebességi egyenletek felállítás. Összetett reakciók sebességi egyenletei.

KÉM/43 Válogatott fejezetek a kvantumkémiaiából

[Mayer István – MAIMAAT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető

A tárgy lényege: a kvantumkémia legfontosabb eredményeinek összefoglalása azok teljes levezetésének (bizonyításának) részletes bemutatásával. A Born-Oppenheimer Hamilton operátor. Általános elvek és tételek (variációs elv és kapcsolódó kérdések, Hellmann-Feynman tétel, viriáltétel.) Lineáris variációs módszer és Löwdin-ortogonalizációk. Perturbációs módszerek (Rayleigh-Schrödinger PT, Brillouin-Wigner PT, variációs perturbációs módszer). Determináns hullámfüggvények (tulajdonságok, mátrixelemek, stb). A Hartree-Fock módszer és változatai. Populációs analízis, kötésrend. Az elektronkorreláció. Kötelező irodalom: Mayer I.: Fejezetek a kvantumkémiaiából, Mérnök-továbbképző, 1983; Internetről letölthető kézírásos jegyzetek (2006), Ajánlott irodalom: I. Mayer: Simple Theorems, Proofs, and Derivations in Quantum Chemistry. Kluwer Academic/Plenum Publishers, New York 2003. (Oroszul: Izbrannije Glavi Kvantovoj Himiji, Moszkva 2006.)

KÉM/44 Bioorganikus kémia haladóknak

[Medzihradzky Kálmán – MEKMAAE.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető

Gyógyszer hatóanyagok szerkezete és hatásmechanizmusa. Peptidhormonok szerkezete és hatása. Antibiotikum származékok szerkezete és hatásmechanizmusa.

KÉM/45 Bioszerves kémia haladóknak

[Medzihradzky Kálmán – MEKMAAE.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető

Gyógyszer hatóanyagok szerkezete és hatásmechanizmusa. Peptidhormonok szerkezete és hatása. Antibiotikum származékok szerkezete és hatásmechanizmusa.

KÉM/46 Molekulák alakja, hasonlósága és komplementaritása

[Mezey Pál – MEPMAAT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető

EÖTVÖS LORÁND TUDOMÁNYEGYETEM - TERMÉSZETTUDOMÁNYI KAR
KÉMIA DOKTORI ISKOLA KÉPZÉSI TERVE

Molekulák térszerkezete. Potenciálfelületek. Molekulák topológiai leírása. Kémiai reakciók topológiai leírása.

KÉM/47 Ciklo-és nagytagszámú peptidok szintézise

[Mező Gábor – MEGLACT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételt

Az előadás sorozat épít az MSc képzés keretében bemutatott peptidszintetikus alapeljárások ismeretére. Ennek továbblépéseként a szilárdfázisú peptidszintetikus eljárások mélyebb megismerése alapozza meg az előadásban bemutatott módszerek megértését. A kurzus azokkal a bonyolultabb peptidszintetikus eljárásokkal foglalkozik, amelyek segítségével előállíthatók természetes vagy mesterséges ciklopeptidok a térszerkezet stabilizálása és/vagy biológiai hatékonyság növelés céljából. Bemutatásra kerülnek a különböző kötéstípust tartalmazó ciklikus vegyületek szintézisének módszerei, az adott eljáráshoz szükséges aminosavszármazékok, a felmerülő problémák és azok kiküszöbölése. Összehasonlítjuk a különböző módszerek hatékonyságát és az előállított vegyületek biológiai hatékonyságát. A nagytagszámú peptidok (50-200 aminosavat tartalmazó polipeptidok, miniproteinek) szintézisének bemutatása során kitérünk a konvergens szilárdfázisú peptidszintézisre és a különböző ligációs eljárásokra (pl. kemoszelektív ligáció, natív kémiai ligáció). Az előadás összességében betekintést nyújt a mai modern peptidkémiai alkalmazott módszerekbe. Irodalom: Solid phase peptide synthesis: A practical Guide (Eds.: S.A. Kates, F. Albericio), 2000.; Synthesis of peptides and peptidomimetics (Eds.: M. Goodman, C. Toniolo, L. Moroder), Houben-Weyl, 2004.; Továbbá az előadás tematikájában felhasznált publikációk.

KÉM/48 Térhálós szerkezetek kolloidkémiaja

Nagy Miklós – NAMKAAT.ELTE

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételt

Térhálós szerkezetek jelentősége a kémiában és a természettudományokban. Térhálós szerkezetek definíciója. A térháló alapvető szerkezeti jellemzői: hálópont, tapadási hely, hálólánc, funkcionalitás. Kis és nagy koordinációjú hálózatok. Hálólánccok és hálópontok térbeli eloszlásának lehetőségei. Térhálós szerkezetek keletkezéséhez vezető legfontosabb folyamatok. Térháló topológiai kémiai átalakítása. Térháló mechanikai és termodinamikai tulajdonságai. A Mooney – Rivlin egyenlet. Térháló elméleti modelljei, reális térháló tulajdonságai. Térhálókra vonatkozó térfogat invariáns összefüggések. Térháló polimerek duzzadása. A duzzadás termodinamikai leírása. A duzzadás jelenségének felhasználása térháló kvantitatív jellemzésére. A mechanikai és termodinamikai tulajdonságok kapcsolata, Részlegesen nyitott rendszerek biológiai jelentősége. Asszociációs és aggregációs jelenségek amfil térhálóban. A fizikai tapadási helyek és a kémiai hálópontok szétválasztásának lehetősége. A kristályosság hatása a polimer térháló tulajdonságaira. Polielektrolit térháló duzzadási és mechanikai tulajdonságai. Térháló viselkedése nagy izotróp és anizotróp deformációknál: a Gauss-i és nem Gauss-i tartomány. Biopolimer gélek. Térháló néhány fontosabb alkalmazása. Javasolt irodalom: egyéni megbeszélés alapján.

KÉM/49 Molekulamodellzés

[Náray-Szabó Gábor – NAGKAAT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételt

Az előadásban áttekintést adunk a molekulamodellzési módszerekről és azok alkalmazásairól. A kvantummechanika elméleti alapjainak deduktív rendszerű bemutatása után tárgyaljuk a molekulamechanikai és számítógépes grafikai módszereket, majd a kémiai kötés fogalmát és típusait. Áttekintést adunk arról, mennyire alkalmasak a számítások a molekulák és összetett molekuláris rendszerek különböző tulajdonságainak meghatározására, illetve a kémiai reakciók lefutásának

EÖTVÖS LORÁND TUDOMÁNYEGYETEM - TERMÉSZETTUDOMÁNYI KAR
KÉMIA DOKTORI ISKOLA KÉPZÉSI TERVE

vizsgálatára. Számos példán keresztül mutatunk rá arra, hogy a mai fejlettségi szinten a számítási kémiai módszerek felhasználásával kiegészíthetjük, nem egy esetben pótolhatjuk a kísérleti mérési adatokat és a közvetett tapasztalatokat. Az áttekintés felöleli a néhány atomos molekuláktól a több ezer atomos fehérjékig terjedő mérettartományt. Kötelező irodalom: W.J. Hehre, L. Radom, P.v.R. Schleyer, J.A. Pople, *Ab Initio Molecular Orbital Theory*, Wiley, New York, 1985.; G. Náray-Szabó, P.R. Surján, J.G. Ángyán, *Applied Quantum Chemistry*, Akadémiai, Budapest, 1987. Ajánlott irodalom: K.B. Lipkowitz, D.B. Boyd, *Reviews in Computational Chemistry*, VCH, New York, Vols. 1-..., 1990-2007.; Keserű Gy., Náray-Szabó G., *Molekulamechanika*, Kém. újabb eredm. 80. köt., Akadémiai, 1995, 7-98. old.

KÉM/50 Oszcilláció és egyéb dinamikai jelenségek a kémiában

[Orbán Miklós – ORMKAAT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető

Bevezetés: definíciók, történeti áttekintés, jelentőség. A kémiai oszcilláció kialakulásának termodinamikai és kinetikai feltételei nyitott és zárt rendszerekben. Autokatalízis, bistabilitás, oszcilláció a kémiában. Oszcillátor családok: bromát-, klorit-, oxigén-, mangán-, bromát-, kén-oszcillátorok, pH oszcillátorok, nem-vegyértékváltó ionok indukált oszcillációja. Kémiai hullámok: dinamikus és stacionárius szerkezetek. Biológiai oszcillációk. Irodalom: Bazsa György (szerkesztő): *Nemlineáris dinamika és egzotikus kinetikai jelenségek kémiai rendszerekben*, egyetemi jegyzet, Debrecen-Budapest-Gödöllő, 1992.; Field R. J, Burger M. (Eds.): *Oscillations and Traveling Waves in Chemical Systems*. Wiley & Sons, New York, 1985.; Epstein I. R., Pojman J.: *An Introduction to Nonlinear Chemical Dynamics: Oscillations, Waves, Patterns and Chaos*, Oxford Univ. Press., New York, Oxford, 1998.

KÉM/51 Fehérjék és peptidek térszerkezetvizsgálata NMR spektroszkópiai módszerekkel

[Perczel András – PEAKABT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető

Az előadás célja a szerves és biomolekulák konformációanalízisének elméleti és gyakorlati megalapozása, a szerkezetkutatás elsajátításához szükséges spektrumértékelések és molekulamodellizések alapjainak elsajátítása. A speciális kollégium elsődleges célja a rezgési- (FT-IR), elektronikus- (UV, CD) és magmágneses (NMR) spektroszkópiai módszerek, továbbá a röntgen-diffrakciós lehetőségek, valamint különböző szintű elméleti közelítések megismertetése, különös tekintettel a fehérjék és peptidek térszerkezetfelderítésének témakörében. Javasolt irodalom: A. Perczel, I. Laczkó és M. Hollósi *Peptidek térszerkezetvizsgálata* (A kémia újabb eredményei, 1994), Az előadás elektronikus jegyzete. Ajánlott irodalom: J.N.S. Evens *Biomolecular NMR Spectroscopy* (Oxford Univ. Press. 1995).; A.K. Downing *Protein NMR techniques Second Edition* (Humana Press 2004)

KÉM/52 Pulzusszekvenciák az NMR szerkezetvizsgálatban

[Perczel András – PEAKABT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető

A 12-18 tesla mágneses térerejű készülékek megteremtették a lehetőségét annak, hogy meghatározzuk a 30-50 kD-nál nem nagyobb tömegű fehérjék oldatfázisú téralkatát. Ezzel az NMR olyan viszonylag új kutatási területek fejlődését határozza meg, mint a biotechnológia számos ága, a szerkezeti biokémia, a molekuláris biológia vagy akár a virológia. A kurzus, amely korábbi NMR ismeretekre nem nagyon alapoz, célul tűzi ki az oldatfázisú NMR-spektroszkópia alapjelenségének ismertetése mellett az egy- és a több-dimenziós mérések elméletének és gyakorlatának elsajátítását. Előbb a vektormodell, majd különösen a szorzatoperátor

EÖTVÖS LORÁND TUDOMÁNYEGYETEM - TERMÉSZETTUDOMÁNYI KAR
KÉMIA DOKTORI ISKOLA KÉPZÉSI TERVE

elméletének bevezetése lehetővé teszi, hogy akár igen összetett pulzusszekvenciák (pl. HSQC, HNCA) is jól-érthetővé váljanak. A kurzus anyagának további része a jelhozzárendelési stratégiák, valamint a fehérjék szerkezetszámolás ismertetése. Javasolt irodalom: P.J. Hore Mágneses Magrezonancia (Nemzeti Tankönyvkiadó, 2003); Az előadás elektronikus jegyzete. Ajánlott irodalom: J. Cavanagh, W.J. Fairbrother, A.G. Palmer III & N.J. Skelton Protein NMR Spectroscopy Academic Press 1996.; J. Keeler Understanding NMR Spectroscopy, John Wiley 2005

KÉM/53 GC-MS és HPLC az analitikában

[Perlné Molnár Ibolya – PEMLAAE.ELTE](#)

Kochis Andrea – KOAKABT.ELTE - adminisztrátor

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételhető

A kromatográfiai eljárások két fő irányának összehasonlító értékelése a releváns funkciós csoportok és matrixok figyelembevételével, az alábbi bontásban és szempontok szerint: 1. A kollégium anyagának tárgy szerinti csoportosítása: A hidroxil csoport meghatározása. alkoholok, fenolok, vicinalis szénatomokon hidroxilcsoportot tartalmazó vegyületek. A karboxilcsoportot tartalmazó vegyületek elemzése. alifás karbonsavak, aromás és hidroaromás (fenol)karbonsavak. Az amino- és karboxilcsoportot egyidejűleg tartalmazó aminosavak kromatográfiája. szabad állapotban, fehérje hidrolizátumokban. 2. Az egyes csoportokba tartozó eljárások tárgyalásának szempontjai: szabad állapotban és származékok formájában, HPLC-vel, eltérő detektálási technikák felhasználásával, valamint szabad állapotban és származékok formájában, GC/(MS)-sel.

KÉM/54 Kvantumkémiai módszerek

[Pongor Gábor – POGKABT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételhető

Ez a tárgy magasabb szinten, példák részletezésével tárgyalja a megadott területeket. A kvantumkémia története. Atomi egységek. A független-részecske közelítés. Slater-determináns. Az UHF és RHF eljárások. Bázis sorozatok. Roothaan-Hall egyenletek. Az SCF-módszer. Direkt, féldirekt eljárások. MIA közelítés. Potenciálfelületek. Külső perturbációk szerepe. Az analitikus deriváltszámítás előnyei és hátrányai. A deriváltak számítása. Az egyensúlyi geometria meghatározása. A Hessian megbecslése. Belső koordináták használata. Stacionárius pontok jellemzése. Második deriváltak. Reakcióutak, reakciókoordináták kérdései. A Yelyashevich-Wilson rezgési egyenlet. Molekuláris erők empirikus skálázása. A Természetes Belső Koordináták (Natural Internal Coordinates) rendszere. A Hartree-Fock módszer hátrányai. A konfigurációs kölcsönhatás ("full" CI). A többtest-perturbációelmélet Moller-Plesset partícióval. Slater szabályok. Brillouin tétele. A Coupled Cluster módszer. A csonkolt CI módszer. A HPHF módszer. Méret-konzisztencia. Az elektronkorreláció effektusainak felosztása. A VB módszer. Az MC-SCF és a CAS-SCF eljárások. A GVB módszer. Első- és másodrendű redukált sűrűségmátrixok. Természetes (spin)pályák. Az UNO-CAS módszer.

KÉM/55 Kvantumkémiai néhány modern eljárása

[Pongor Gábor – POGKABT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételhető

Ez a tárgy részletesen, példák említésével tárgyalja a megnevezett fejezeteket. A viriál-tétel a klasszikus és a kvantummechanikában. A Hellmann-Feynman tétel. Kato tétele. Az "avoided crossing" (elkerült keresztezés) tétele. "Lényegkiemelő módszerek" a kvantumkémiaiában: a populációs analízisek. Mulliken-féle populációs analízis. A Wiberg-Mayer-féle kötésiindexek. A Clementi-féle energiapartíciós módszer. A Bader-féle "kötés kritikuspont" analízis. A korszerű sűrűségfüggő (DFT)-módszerek. A Hamilton-operátor. Hohenberg és Kohn I. tétele. A Holografikus Elektronsűrűség tétele. Hohenberg és Kohn II. tétele. A Kohn-Sham

EÖTVÖS LORÁND TUDOMÁNYEGYETEM - TERMÉSZETTUDOMÁNYI KAR
KÉMIA DOKTORI ISKOLA KÉPZÉSI TERVE

módszer. Röviden az X , Scattered Wave X , HFS módszerekről. Bázis sorozatok a DFT eljárásokban. Cserélődési és korrelációs funkcionálok. Lokális és nem-lokális funkcionálok. A DFT-eljárások problémái, értékelése. NMR kémiai eltolódások számítása. Az elektromágneses tér jellemzése. Homogén mágneses tér. Az elektromágneses tér befoglalása a Hamilton-operátorba. Kémiai eltolódás (izotróp és anizotróp rész). Mérték-invariancia. A GIAO, IGLO, LORG módszerekről.

KÉM/56 Rendezetlenség kondenzált fázisokban

[Pusztai László – PULMAAT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető

Kondenzált fázisok modellezése. Szimulációs módszerek elmélete és alkalmazása kondenzát fázisok vizsgálatában.

KÉM/57 Szerves fluorvegyületek kémiája

[Rábai József – RAJKAAT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető

Az egy féléves speciális kollégium során a szerves fluorvegyületek kémiájának kritikai vizsgálatára kerül sor. Az előadások során válogatott anyag kerül bemutatásra, melynek segítségével lehetőség nyílik a fluortartalmú és a fluort nem tartalmazó vegyületek kémiájának összehasonlítására és a különbségek értelmezésére is. A fluor-organikus kémia az utóbbi évtizedekben nagy fejlődésen ment keresztül, mégis a legtöbb modern szerves kémiai tankönyv is csak érintőlegesen foglalkozik vele. Az ELTE Szerves Kémiai Tanszékén ez az új speciális kollégium a fluor-organikus alapismeretek bemutatásával és elsajátításával a fluoros kutatások iránt érdeklődő hallgatók kiválasztását segíti elő. Főbb fejezetek: 1. A szerves fluorvegyületek kémiájának általános elemzése. 2. Teljesen fluorozott vegyületek előállítása. 3. Részlegesen fluorozott vegyületek előállítása. 4. Fluor- vagy fluorokarbon szubsztituensek hatása a reakciócentrumokon. 5. Halogének nukleofil helyettesítése fluorokarbon rendszerekben. 6. Eliminációs reakciók. 7. Polifluoralkánok, -alkének, -alkinek és származékaik. 8. Oxigén-, kén- és nitrogén tartalmú funkciós csoportok. 9. Fémorganikus vegyületek. 10. Biológiai aktív szerves fluorvegyületek. 11. Fluorvegyületek tulajdonságai és alkalmazásai. 12. Fluoros kétfázisú reakciók és fluoros szintézisek. Irodalom: 1. FLUORINE, the First Hundred Years (1886-1986), Eds.: R. E. Banks, D. W. A. Sharp, J. C. Tatlow; Elsevier Sequoia, Lausanne and New York, 1986. 2. Chemistry of Organic Fluorine Compounds, 2nd ed., M. Hudlicky; Ellis Horwood and Prentice Hall, New York, 1976, 1992. 3. Chemistry of Organic Fluorine Compounds II., A Critical Review, Eds.: M. Hudlicky, A. Pavláth, ACS Monograph 187; American Chemical Society, Washington, DC, 1995. 4. Synthetic Fluorine Chemistry, G. A. Oláh, R. D. Chambers, G. K. Surya Prakash; Wiley, New York, 1992. 5. Fluorine in Organic Chemistry, R. D. Chambers; R. D. Chambers (Wiley-Interscience) Durham, 1973. 6. Organofluorine Chemistry – Principles and Commercial Applications, Eds.: R. E. Banks, B. E. Smart, J. C. Tatlow; Plenum, New York, 1994. 7. Fluorine Compounds – Chemistry and Applications; N. Ishikawa, Y. Kobayashi; Kodansha Scientific, 1979.

KÉM/58 Felületvizsgáló módszerek IV.

[Riedel Miklós RIMKAAT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető

A felületvizsgáló módszerek áttekintése a gerjesztő részecskék és a szekunder részecskék szempontjából. Elektrongerjesztéses (AES, EMP, LEED, REED), ionbombázásos (RBS, SIMS, SNMS) és fotonbombázásos (ESCA, LAMMA, XPS) módszerek. A módszerek elve, készülékek. A felületvizsgáló módszerek teljesítőképességének összehasonlítása és alkalmazási területei. Példák a mérési eredmények, spektrumok értékelésére. Kötelező irodalom: Riedel Miklós - Főző

EÖTVÖS LORÁND TUDOMÁNYEGYETEM - TERMÉSZETTUDOMÁNYI KAR
KÉMIA DOKTORI ISKOLA KÉPZÉSI TERVE

Attila: Felületvizsgáló módszerek (elektronikus tananyag). Ajánlott irodalom: O. Brümmner (szerk.): Szilárd testek vizsgálata elektronokkal, ionokkal és röntgensugárral, Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1984. H. Düsterhöft, M. Riedel, B-K Düsterhöft: Einführung in die Sekundärionen-massenspektrometrie - SIMS, Teubner Vlg. Stuttgart, Leipzig, 1999. Charles Evans Assoc. Analytical Services 1999-2000 (elektronikus információs anyag)

KÉM/59 Oldott és szilárd anyagok NMR-spektroszkópiájának elmélete és mérés technikája
V:

[Rohonczy János ROJKABT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető

1. A szilárd anyagokra jellemző mágneses kölcsönhatási formák és hatásuk az NMR-spektrumokra. 2. A kölcsönhatások leírása szferikus tenzor-reprezentációval. 3. Homo- és hetronucleáris lecsatolási és visszaesatolási módszerek. 4. A kölcsönhatások csökkentése fizikai és spintérebén: mágikus szög körüli forgatás. 5. Keresztpolarizációs kísérletek elmélete és gyakorlata. 6. Félegész spinű magok mérésének sajátos módjai: DAS, DOR, MQMAS és STMAS mérések. 7. Az egész spinű magok mérésének gyakorlati korlátai. 8. Korrelációs 2D kísérletek szilárd fázisba

KÉM/60 Fizikai szerves kémia

[Ruff Ferenc – RUFEAAT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető

A tárgy a szerves reakciók mechanizmusának vizsgálatában alkalmazott speciális fizikai-kémiai elméletek és reakciókinetikai módszerek ismertetését tűzi ki célul, és a következő fejezeteket tárgyalja: Izotópeffektus (kémiai egyensúlyok izotópeffektusa, a kinetikai izotópeffektus elmélete, primer és szekunder kinetikai izotópeffektus, oldószer-izotópeffektus). Közeghatás (az oldószer hatása reakciók sebességére, specifikus solvatáció, empirikus oldószerhatás-paraméterek, sóhatás). Savak, bázisok, elektrofilek, nukleofilek. Homogén katalízis (sav-bázis katalízis, nukleofil és elektrofil katalízis, szomszédcsoport-közreműködés, micellakatalízis, enzimkatalízis). Kötelező irodalom: Ruff Ferenc, Csizmadia G. Imre: Szerves reakciómechanizmusok vizsgálata. Nemzeti Tankönyvkiadó, Budapest (2000). Ajánlott irodalom: Eric V. Anslyn, Dennis A. Dougherty: Modern Physical Organic Chemistry. University Science Books, USA (2006). Dr. Szántay Csaba: Elméleti Szerves Kémia, 3. kiadás. Műszaki Könyvkiadó, Budapest (1984).

KÉM/61 Nagyérzékenységű nukleáris módszerek a környezeti analitikában

[Salma Imre – SAIKAAT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető

A nukleáris analitikai módszerek helye az analitikai módszerek között. Neutronaktivációs analízis (NAA): az aktiválás időtörvényei, összetett nukleáris átalakulások kinetikája, Bateman-Rubinson egyenlet. Aktivációs neutronforrások. A γ -sugárzás mérése és értékelése: spektrométerek jellemzői, működési elvük és kalibrálásuk, mérési statisztika. Az NAA módszerei: abszolút, relatív, komparátoros és paraméteres standardizálás. Interferenciák. Az NAA változatai: instrumentális, radiokémiai NAA, szubsztöchiometriai elv, prompt- γ NAA. Környezetkémiai alkalmazások. Proton-indukált röntgenemissziós analízis (PIXE): könnyű töltött részecskék kölcsönhatása az anyaggal. A PIXE módszerei: standardizálási eljárások különböző targetvastagság esetén. Az alkalmazott gyorsítók. Energiadisziperzív röntgenspektrometria. Mikro-PIXE: nyalábfókuszálás és térbeli felbontás. A PIXE tipikus alkalmazási köre a környezetkémiai: aeroszolok, biológiai eredetű anyagok, régészet. Kötelező irodalom: Salma, I., Műszeres neutronaktivációs analízis. In: Az elemanalitika korszerű módszerei, szerk. Záray, Gy., 417–505. old., Akadémiai Kiadó, Budapest, 2006. Ajánlott irodalom: Erdtmann, G. – Petri, H.:

EÖTVÖS LORÁND TUDOMÁNYEGYETEM - TERMÉSZETTUDOMÁNYI KAR
KÉMIA DOKTORI ISKOLA KÉPZÉSI TERVE

Nuclear Activation Analysis: Fundamentals and Techniques. In: Treatise on Analytical Chemistry (Eds.: Elving, P. J. – Krivan, V. – Kolthoff, I. M.), Wiley, New York 1986.; Vértes, A. – Nagy, S. – Klencsár, Z. (Eds.): Handbook of Nuclear Chemistry. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht 2003.

KÉM/62 Válogatott fejezetek a klasszikus fizikai kémiából

[Schiller Róbert – SCRHAAT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételt

Egyensúlyi statisztikus mechanika (rövid áttekintés). Irreverzibilis termodinamika (rövid áttekintés). Információ és entrópia. Fluktuációk, egyensúlyi és stacionárius folyamatok. Transzport egyenletek. Stochasztikus folyamatok, transzport együtthatók elmélete. Perkoláció

KÉM/63 Fémkomplexek oldatreakciói és homogén katalízis

[Simándi László SILLABT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételt

Komplexek osztályozása. Ligandumtípusok. Egyensúlyi reakciók. A katalízis alapjai. TON, TOF.

KÉM/64 Homogén katalízis

[Simándi László SILLABT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételt

Katalízis alapjai. Hidrogénezési reakciók. Katalitikus ciklus, szelektivitás. Ligandum hatása a folyamat lefutására.

KÉM/65 Biopolimerek elméleti vizsgálata

Simon István – SIIMAAAT.ELTE

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételt

"Fehérjeszerkezetek elméleti vizsgálata" című heti két órás előadás bemutatná a fehérjék elsődleges szerkezetének, aminosav sorrendjének elemzését és kitérne a motívumkeresés és a homológia azonosítás céljára kidolgozott vizsgálatokra. Tárgyalná továbbá a vízoldható és a transzmembrán fehérjék térszerkezetének sajátosságait, az elsődleges szerkezet, a térszerkezet, a fehérje stabilitás és a funkció közötti összefüggéseket. A hangsúlyt a statisztikus (bioinformatikai) megközelítésre helyezném, de kitérnék a molekulamechanikai és molekuladinamikai vizsgálatokra is.

KÉM/66 Alkalmazott NMR-spektroszkópia

[Sohár Pál – SOPKAAT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételt

Hidrogén-rezonancia. Flexibilis molekulák spektruma, jelalak-analízis. Szénrezonancia-spektroszkópia. A széneltolódásokat megszabó tényezők, téreffektus. Oldószerhatások, siftreagensek, kémiai indukált magpolarizáció. NMR-méréstechnika. CW-készülékek, integrált spektrum, hőmérsékletfüggés vizsgálata. FT-spektroszkópia, pulzusgerjesztés. Kettősrezonancia-módszerek, NOE, kapuzott lecsatolások. DEPT, relaxációs idők mérése. 2D-NMR spektroszkópia. COSY, HSC, NOESY. NMR-tomográfia.

KÉM/67 Az NMR spektroszkópia elméleti alapjai

[Sohár Pál – SOPKAAT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételt

Az NMR spektroszkópia elméleti alapjai. Fizikai alapfogalmak. A kémiai eltolódás és összetevői. Spin-spin kölcsönhatások, csatolási állandók. Elsőrendű felhasadás, multiplicitás- és intenzitákszabályok. Magasabb-rendű kölcsönhatások, távolható

EÖTVÖS LORÁND TUDOMÁNYEGYETEM - TERMÉSZETTUDOMÁNYI KAR
KÉMIA DOKTORI ISKOLA KÉPZÉSI TERVE

csatolások. Kémiai és mágneses ekvivalencia, spin-rendszerek. Az NMR spektrumok kvantumkémiai értelmezése. A leggyakoribb spin-rendszerek kvantumkémiai tárgyalása.

KÉM/68 Matematikai módszerek a kvantumkémiaiában I.

[Surján Péter – SUPKAAT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető

Az alapállapot meghatározása. Variációs elv, momentumok módszere. Eckart-egyenlőtlenség. Rayleigh-Schrödinger és Brillouin-Wigner perturbációs számítás. Perturbációs képletek extenzivitása. Redukált rezolvens. Perturbációs sorok konvergenciája, divergens sorok felösszegzése. Particionálási technika. Hullámoperátor, reakció-operátor, Lippman-Schwinger egyenlet, Bloch egyenlet, Csatolt klaszter módszerek. A másodkvantált formalizmus kvantumkémiai alkalmazásai. Soktest-perturbációs számítás. Elektron-sűrűség, Hohenberg-Kohn tétel, sűrűségmátrixok, természetes spinpályák.

KÉM/69 Matematikai módszerek a kvantumkémiaiában II.

[Surján Péter – SUPKAAT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető

Gerjesztett és ionizált állapotok. Az átfedés matematikája: nemhermitikus operátorok, biortogonális technika, ortogonalizációs eljárások. Sajátértékegyenletek gerjesztett állapotokra, Huzinaga típusú egyenletek. Mozgásegyenlet (EOM, equation-of-motion) formalizmus. Teljes rezolvens, Green függvény. Az egyrészeszkés Green függvény, polarizációs propagátor. Superoperátor formalizmus. Dyson egyenlet. Ionizációs potenciálok számítása. Spinoperátorok és spinállapotok, permutációs szimmetriák, Young-tablók. Irdalom: P. R. Surján: *Second Quantized Approach to Quantum Chemistry*, Springer, Heidelberg, 1989.; P.-O. Löwdin: *Studies in Perturbation Theory I-XIII*. (cikksorozat több újságban); R. McWeeny: *Methods of Molecular Quantum Mechanics*, Academic, London, 1989.

KÉM/70 Peptidmimetikumok

[Süliné Vargha Helga – EHA.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető

Polipeptidok szerkezete, szintézise. Oldatfázisú és szilárdfázisú peptidszintézis. Peptidmimetikumok fajtái, szintézisük és felhasználásuk.

KÉM/71 Elektrod-folyamatok kinetikája

[Szabó Kálmán – SZKKAAT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető

Az elektromos kettős réteg szerkezete. Elektrokémiai termodinamika. Belső, külső és felületi potenciál értelmezése és a közöttük lévő kapcsolat. Elektromos és adszorpciós jelenségek értelmezése szilárd-oldat fázisok határán. Elektrokapilláris jelenségek, töltésnullapont-potenciál, a fémek hidrofilitása. Az elektromos kettős réteg felépítését tárgyaló modellek összehasonlítása (a Helmholtz modelltől a computer szimulációs modellekig). A kettős réteg vizsgálatának elektrokémiai és nem elektrokémiai módszerei (pl. infravörös és Raman spektroszkópia). Az elektrod-folyamatok kinetikája. Az elektrod-folyamatok általános jellemzése. A különböző polarizációs fajták tárgyalása. A kettős réteg jellemzői és az elektrod-folyamatok sebessége közötti összefüggések. Az elektrod-folyamatok energetikai viszonyait leíró elméletek tárgyalása. Az elektrod-fém az oldószer tulajdonságai és a folyamatok aktiválási energiája közötti kapcsolat. Az elektrod-folyamatok vizsgálatának módszerei. A felsoroltak gyakorlati felhasználásának néhány vonatkozása: korrózió, kémiai áramforrások, ipari eljárások.

KÉM/72 A kvantumkémia modern módszerei

[Szalay Péter – SZPKAET.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételhető

A másodkvantált formalizmus: keltő és eltüntető operátorok, ezek műveletei, felcserélési relációik; Wick-tétel; Fermi-vákuum. A perturbációszámítás másodkvantált formalizmusban: diagrammatikus tárgyalás; másod rend, harmad rend, negyed rend „disconnected” diagrammjai. Coupled-Cluster (CC) elmélet: exponenciális operátor; egyenletek; iteratív eljárás és ennek kapcsolata a perturbációszámításhoz; a klaszteroperátor levágása, a gyakorlatban használt CC módszerek; CCSD(T) módszer lényege. A Configuration Interaction (CI) módszer: hullámfüggvény „ansatz”, ennek tulajdonságai; a sajátértékprobléma iteratív megoldása, Davidson-eljárás; direkt CI módszer; multireferencia koncepció; az „unitér csoport módszer”, Shavitt-gráf és annak használhatósága. Méretkonzisztencia: a CI módszer javításának lehetőségei: Davidson típusú korrekciók, és CEPA típusú iteratív eljárások. Gradiens elmélet: tulajdonságok számításának lehetőségei; általánosított Hellman-Feynman tétel; energiafukcionálok; geometriaoptimalás. Kötelező irodalom: kiadott anyag; Ajánlott irodalom: D.R. Yarkony (szerk.) Modern Electronic Structur Theory, World Scientific, 1995.

KÉM/73 A molekuladinamika spektroszkópiái alkalmazásai

[Szalay Péter – SZPKAET.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételhető

Az elektronok és atommagok mozgásának szétválasztása, illetve együttes kezelése. A molekulák és az elektromágneses tér kölcsönhatásának leírása időfüggő perturbációszámítással. A fotodinamikai események: gerjesztés, fluorszcencia, fotodisszociáció. Spektrumok szimulációjára alkalmas módszerek: az ún. „linear vibronic coupling” modell és a időfüggő molekuladinamika. Fotokémiai folyamatok: kónikus átmetszések, ezek leírása; a fotokémiai folyamatok leírására alkalmas kvantumos és klasszikus dinamikai módszerek, „surface hopping”. Kötelező irodalom:kiadott anyag. Ajánlott irodalom: R. Schinke: Photodissociation dynamics, Cambridge University Press, 1995. H. Köppel, W. Domcke, L.S. Cederbaum: Multimode Molecular Dynamics beyond the Born-Oppenheimer Approximation, in Advances of Chemical Physics, 57, 59-246, 1984.

KÉM/74 A fotoionizáció spektroszkópiái alkalmazása

[Szepes László – SZLKACT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételhető

A fotoionizációs spektroszkópia elmélete. Az UPS berendezések felépítése, főbb egységei. Az UPS alkalmazása. Kötés-disszociációs energiák kísérleti meghatározása.

KÉM/75 Rendszeres fémorganikus kémia

[Szepes László – SZLKACT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételhető

Az előadás során a következő tématerületek tárgyalására kerül sor: - Bevezetés és definíciók; - A fém-szén kötés; - Fontosabb ligandumok; - Osztályozás a ligandumok donor-akceltor tulajdonsága alapján; - A főcsoportbeli elemek szerves származékai; - Az átmenetifémek szerves kémiája - Fém-fém kötés és oligonukleáris átmenetifém-klaszterek

KÉM/76 Sokváltozós statisztikai módszerek

[Szepesváry Pál – SZPLAAT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételhető

Statisztikai alapfogalmak. Egy és többváltozós rendszerek általános jellemzése.

EÖTVÖS LORÁND TUDOMÁNYEGYETEM - TERMÉSZETTUDOMÁNYI KAR
KÉMIA DOKTORI ISKOLA KÉPZÉSI TERVE

Többváltozós statisztika alapjai. Alkalmazott többváltozós statisztikai példák.

KÉM/77 Fémek korróziójának vizsgálata

[Sziráki Laura – SZLKABT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételhető

Korróziós (elektrokémiai) folyamatok elméleti alapjai példákon keresztül: Fémek anódos oldódásának modelljei. A fém textúrájának és a felület mikrostruktúrájának hatása az anódos oldódásra. Fémek passzíválódása. Passzív rétegek kémiai, szerkezeti jellemzése, elektromos (félvezető) tulajdonságai. Ponthiba modell. A korrózió katódos folyamatai: hidrogénfejlődés, oxigénredukció mechanizmusa. Saját fémionok hatása a korrózióra, autokatalitikus korrózió. Korrózió fajtái: kiváltó okok és mechanizmusok; lyukkorrózió, kristályközi korrózió, feszültségkorrózió. Korróziósebesség meghatározási módszerek: Coulometria, polarizációs görbék analízise. Rp-módszer. Felharmonikus analízis. Elektrokémiai impedanciaspektroszkópia alkalmazása a korróziós vizsgálatokban. Tömegtranszport impedancia függvények. Kronopotenciometria, kronamperometria, ciklikus voltammetria alkalmazása a passzíválódás, helyi korrózió jellemzésére. Kötelező irodalom: Dévay J.: Fémek korróziója és korrózióvédelme Műszaki Könyvkiadó Budapest, 1979.; valamint szakcikkek speciális témakörökhöz. Ajánlott irodalom: Kiss László: Az elektrokémiai fémoldódás kinetikája, Akadémiai Kiadó, Budapest, 1980.; P. Marcus(Ed): Corrosion Mechanism in Theory and practice, Marcel Dekker, 2002.; P. Marcus and F. Mansfeld (Eds): Analytical Methods in Corrosion Science and Engineering, CRC Taylor and Francis, (Ch. 11-13), 2006.

KÉM/78 Aszimmetrikus szintézisek

[Timári Géza – TIGMAAT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételhető

Enantioszelektivitás, diasztereoszelektivitás. Királis reagensek alkalmazása. Királis katalízis. Enantioszelektív hidrogénezés, epoxidálás, dihidroxilálás. Trost reakció és alkalmazásai. Kinetikus és dinamikus kinetikus rezolválás.

KÉM/79 A gázkromatográfia alkalmazásai

[Torkos Kornél – TOKKACT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételhető

Származékképzési módszerek a gázkromatográfiában. Töltetes oszlopok alkalmazása a gázok analitikájában. Split, splitless és PTV injektálási módszerek. „Pulsed/unpulsed” injektálás. Pirolízis gázkromatográfia. Szigetelőolajok vizsgálata, PCB-k meghatározása olajokból. Robbanóanyagok gázkromatográfiája. Élelmiszeranalitikai módszerek. Mikotoxinok meghatározása gabona termékekből. GCMS technikák.

KÉM/80 Elválasztástechnika a szerves kémiában

[Torkos Kornél – TOKKACT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételhető

Az elúciós kromatográfia elmélete. A kromatográfiás csúcs jellemzése. Készülék felépítése. Tányérelmélet, sebességi elmélet, van Deemter egyenlet, lineáris sebesség. Reteniós adatok, injektálási technikák, detektorok. Bioszeparációs módszerek. A folyadékkromatográfia alapjai. Adszorpciós, megoszlási, normálfázisú, fordított fázisú és ioncsere kromatográfia. Méretkizárásos (gél) kromatográfia. Hidrofób kölcsönhatás, affinitás kromatográfia. Elektromigrációs módszerek. Centrifugálás, ultracentrifugálás

KÉM/81 Energiatermelés által okozott környezeti és egészségi károk

[Török Szabina – TOSMABT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételhető

Az energiatermelés fontosabb típusai. Az egyes energiatermelési folyamatok

EÖTVÖS LORÁND TUDOMÁNYEGYETEM - TERMÉSZETTUDOMÁNYI KAR
KÉMIA DOKTORI ISKOLA KÉPZÉSI TERVE

emissziós hatása. Környezeti szennyezések típusai. Légszennyezés energiatermelő folyamatokban. Vízszennyezés energiatermelő folyamatokban. Talajszennyezés energiatermelő folyamatokban. A környezetkárosító folyamatok egészségügyi hatása.

KÉM/82 Lángok kémiája és fizikája

[Turányi Tamás – TUTKAAT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételhető

Az égéstudomány és alapfogalmai: lamináris és turbulens lángok, előkevert és nem előkevert lángok, lamináris égési sebesség, főbb kísérleti elrendezések lángok vizsgálatára; néhány fontosabb égési reakció kémiája: a hidrogén, a nedves CO és a metán égése, korom keletkezése lángokban; alacsony hőmérsékletű szénhidrogén-oxidáció, nitrogén-oxidok keletkezése lángokban, módszerek az NO koncentráció csökkentésére; gázreakciók kémiai kinetikai vizsgálata, az egyes módszerek előnyei és korlátai, a gázkinetikai adatok jellemzői és pontossága; a reagáló áramlások leírása, a mérlegegyenletek numerikus és közelítő analitikus megoldása. Kötelező irodalom: Az előadás jegyzetelt anyaga, kiadható/internetes PowerPoint file. Ajánlott irodalom: J. Warnatz, U. Maas, R.W. Dibble: Combustion: Physical and Chemical Fundamentals, Modeling and Simulation, Experiments, Pollutant Formation, Springer, Berlin, 1996.; I. Glassman: Combustion, 2nd edition, Academic, Orlando, 1987.; S.R. Turns: An introduction to combustion. Concepts and applications, Second edition, McGraw-Hill, Boston, 2000.; M.J. Pilling – P.W. Seakins: Reakciókinetika, Tankönyvkiadó, 1998; Reaction kinetics, Oxford Univ. Press, 1995.

KÉM/83 Reakciómechanizmusok vizsgálata

[Turányi Tamás – TUTKAAT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételhető

Reakciómechanizmusok kifejlesztése: reakciómechanizmusok előállítása kézzel és számítógépi programmal, az automatikus reakciómechanizmus-előállítás módszerei; lokális és globális érzékenységanalízis módszerek, az érzékenységi együtthatók értelmezése; az érzékenységanalízis alkalmazásai; reakciómechanizmusok redukciója: a mechanizmusredukció céljai, anyagfajták és felesleges reakciók elhagyása mechanizmusból; időskála analízis: a kvázistacionárius közelítés (QSSA) története, lényege, hibájának számítása, a lassú sokaságok (ILDM) elmélete és alkalmazása a reakciókinetikában. Kötelező irodalom Az előadás jegyzetelt anyaga, kiadható/internetes vázlat. Ajánlott irodalom: Turányi Tamás: Reakciómechanizmusok vizsgálata, Akadémiai Kiadó, 2010 (ISBN 9789630588508); A.S. Tomlin, T. Turányi, M.J. Pilling: Mathematical tools for the construction, investigation and reduction of combustion mechanisms in: 'Low temperature combustion and autoignition', eds. M.J. Pilling and G. Hancock, Elsevier, 1997, pp. 293-437. A. Saltelli ; K. Chan ; M. Scott (eds.) Sensitivity Analysis. Wiley, 2000 (ISBN: 0471998923). A. Saltelli ; S. Tarantola ; F. Campolongo ; M. Ratto: Sensitivity Analysis in Practice: A Guide to Assessing Scientific Models Wiley, 2004 (ISBN: 0-470-87093-1)

KÉM/84 Alkalmazott számítógépes szimulációk

[Túri László – TULKAAT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételhető

Az előadás célja a folyadékok atomi és molekuláris szerkezetének-dinamikájának kutatásában használt számítógépes szimulációs módszerek megismerése. Az órákon röviden vázoljuk egy-egy technikának az elméleti alapjait, a felmerülő numerikus

EÖTVÖS LORÁND TUDOMÁNYEGYETEM - TERMÉSZETTUDOMÁNYI KAR
KÉMIA DOKTORI ISKOLA KÉPZÉSI TERVE

problémák megoldását és a módszer alkalmazási területét. Klasszikus mechanikai rész: Mechanikai és statisztikus mechanikai alapok, Monte Carlo módszer, potenciálok, molekuláris dinamika, MC és MD eredmények kiértékelése, nemegyensúlyi molekuláris dinamika, kísérleti kapcsolatok. Kvantummechanikai szimulációk: Born-Oppenheimer dinamika, Car-Parrinello dinamika, Szemiklasszikus szimulációk, útintegrál szimulációk. Kötelező irodalom: Az előadás jegyzetelt anyaga, kiadható/internetes vázlat, valamint szakcikkék speciális témakörökből. Ajánlott irodalom: M. P. Allen, D. J. Tildesley, Computer Simulation of Liquids, Oxford University Press, 2003.; J. M. Thijssen, Computational Physics, Cambridge University Press, 2000.; D. Marx, és J. Hütter, Ab Initio Molecular Dynamics: Theory and Implementation (Modern Methods and Algorithms of Quantum Chemistry, szerkesztő: J. Grotendorst, John von Neumann Institute for Computing, Jülich, 1. kötet, 301-449, 2000).

KÉM/85 Elemi reakciódinamika

[Túri László – TULKAAT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető

Az előadás a kémiai reakciók elemi aspektusait tárgyalja, kapcsolatot teremtve a kémiai reakciók molekuláris alapjai és a kísérletileg mérhető kinetikai mennyiségek között. Reaktív és nem-reaktív dinamika alapjai. Szórási elmélet tematikus klasszikus és kvantummechanikai tárgyalása. Reaktív dinamika: a molekuláris dinamika közelítései, potenciálfelületek, kémiai reakciók. Kémiai reakciók sebessége, sebességi állandók. Adiabtikus és nem-adiabtikus reakciódinamika. Nem-reaktív dinamika; bevezetés a transzfer folyamatok dinamikájába. Kötelező irodalom: Az előadás jegyzetelt anyaga, kiadható/internetes vázlat, valamint szakcikkék speciális témakörökből. Ajánlott irodalom: R. D. Levine és R. B. Bernstein, Molecular Reaction Dynamics and Chemical Reactivity, Oxford University Press, 1987.; V. May és O. Kühn, Charge and Energy Transfer Dynamics in Molecular Systems, Wiley, Weinheim, 2004.; C. Cohen-Tannoudji, B. Liu és F. Laloë, Quantum Mechanics, Wiley, New York, 1977.

KÉM/86 Tömegspektrometria II.

[Vékey Károly – VEKLAAT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető

A tömegspektrometria az egyik legfontosabb analitikai módszer. Az előadás során a tömegspektrometria modern módszereit és alkalmazásait tekintjük át, így például a GC-MS, HPLC-MS, MS-MS módszereket, környezet- és gyógyszeranalitikai, proteomikai, klinikai kémiai alkalmazásokat. Az egyes doktoranduszok egyéni feladatokat kapnak: Részletes irodalom után ebből ebből tanulmányt és előadást készítenek, melyeket az előadások végén közösen értékelünk. Ajánlott irodalom: Mass Spectrometry: A Foundation Course by K. Downard

KÉM/87 Nukleáris szerkezetvizsgáló módszerek

[Vértes Attila – VEAKAAT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételtető

Az előadás foglalkozik a Mössbauer-spektroszkópia (MS) magfizikai-, szilárdtest fizikai-, és atomfizikai alapjaival, valamint az MS transzmissziós, reflexiós és konverziós-elektron mérés technikáival. A hallgatóság megismerkedik a szinkrotronsugárzás és a Mössbauer-effektus összekapcsolásán alapuló módszerekkel is. Bemutatásra kerülnek a pozitronannihilációs spektroszkópia (PAS) elméleti alapjai és háromféle mérési lehetősége, a szögkorrelációs, a Doppler kiszélesedés és az élettartameloszlás technikája. A müon spin-relaxáció, -rotáció és -rezonancia (mSR) leírásával és mérési lehetőségeivel, valamint a nehéz negatív részecskékkel képződő egzotikus atomok keletkezésével és bomlásával röviden foglalkozunk. A mérési módszerek kémiai alkalmazási lehetőségeit példák

EÖTVÖS LORÁND TUDOMÁNYEGYETEM - TERMÉSZETTUDOMÁNYI KAR
KÉMIA DOKTORI ISKOLA KÉPZÉSI TERVE

illusztrálják. Ajánlott irodalom: A. Vértes, I. Kiss: Nuclear Chemistry, Akadémiai Kiadó, Elsevier, 1987.; A. Vértes, L. Korecz, K. Burger: Mössbauer Spectroscopy, Akadémiai Kiadó, Elsevier, 1979.; A. Vértes, S. Nagy, Z. Klencsár (editors): Handbook of Nuclear Chemistry, Kluwer Academic Publishers, 2003.

KÉM/88 A plazmaspektroszkópia analitikai alkalmazása

[Záray Gyula – ZAGKAAT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételt

Plazmák fizikai és kémiai jellemzése. Nagyfrekvenciás plazmák, mint sugár- és ionforrások. A plazmába történő mintabevitel módszerei folyadék és szilárd halmazállapotú anyagrendszerek vizsgálatára. Az induktív és kapacitív csatolású, valamint a mikrohullámú plazmák szerepe a nyomelemzés és az elemspeciáció területén. Plazmaforrások alkalmazásán alapuló mérés technikák analitikai teljesítőképességének jellemzői. Kötelező irodalom: Záray Gyula, Az elemanalitika korszerű módszerei, Akadémiai Kiadó 2006.; Szakcikk a fenti tématerületről. Ajánlott irodalom: A. Montaser, P.W. Golightly, Inductively coupled plasmas in analytical atomic spectrometry, WHC, 1997.

KÉM/89 Környezeti analitika

[Záray Gyula – ZAGKAAT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételt

Környezeti minták (gáz, aeroszol, víz, lebegőanyag, iszap, talaj) vételére szolgáló módszerek. Mintaelőkészítési eljárások környezeti minták analitikai kémiai vizsgálatához. Mikrohullámú feltárás és extrakció. Atom- és molekuláris spektroszkópiák, valamint kromatográfiai módszerek szennyezők azonosítására és kvantitatív meghatározására. Monitoring rendszerek (LIDAR, DOAS) szennyezők emissziójának folyamatos vagy időszakos követésére. Kötelező irodalom: Torkos Kornél, Záray Gyula: A bioszférát szennyező anyagok környezetanalitikai vizsgálata, a Nánási Irén szerkesztette Humánökológia c. könyv 8. fejezete. Medicina Könyvkiadó 1999. A témakörhöz tartozó szakcikk. Választható irodalom: Dinya Zoltán és mts-i: Környezetszennyező szerves vegyületek analitikája, Kossuth Egyetemi Kiadó, Debrecen 2002.

KÉM/90 Dúsításos módszerek az atomspektroszkópiában

[Zihné Perényi Katalin – ZIPKAAT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételt

Bevezetés, alapfogalmak. Szennyeződés okai és csökkentésének módjai, laboratóriumi tisztaság, elemvesztés elkerülése. Áramló rendszerű analízis (flow injection analysis, FIA): alapelve, diszperzió, technikai megoldások. Hidridképzés: hidridek fejlesztése, pH, oxidációs állapot és mátrix hatása, fázisválasztás, kifagyasztás (cryotrapping), detektálás. Folyadék-folyadék extrakció: fémkelátok, fémkomplex savak, semleges, koordinatív szolvatált vegyületek stb. extrakciója, oldószer, visszaextrakció. Csapadékképzés: mátrix eltávolítása, lecsapás módszerei, koprecipitáció: nyomelemek leválasztása, hordozó kiválasztása, alkalmazása nyomelemzésben és speciációra. Szorbens extrakció: fémkelátok megkötése apoláris oszlopon és fémionok visszatartása hordozón adszorbeált kelátképzővel, adszorbensek típusai, komplexképző csoportok, technikai megoldások. Dúsítás ioncserélőn, kelátképző ioncserélőn: ioncsere elmélete, egyensúly és szelektivitás, ioncserélő típusok, kelátképző csoportok, hordozók (gyanta, cellulóz, szervesetlen ioncserélők), beépítés FIA rendszerbe. Kapcsolt technikák: speciáció fontossága, elválasztástechnikák (HPLC, GC, kapilláris GC, kapilláris elektroforézis – CE) és atomspektrometriák (ICP-AES, ICP-MS, GFAAS, FAAS stb.) kombinálása, interfész (összekötőelem) megoldások. Field flow fractionation (FFF): elválasztástechnika és dúsítás, elve, típusai, alkalmazási területek. Kötelező irodalom: A hallgatók az előadás anyagát Powerpoint file-ként

EÖTVÖS LORÁND TUDOMÁNYEGYETEM - TERMÉSZETTUDOMÁNYI KAR
KÉMIA DOKTORI ISKOLA KÉPZÉSI TERVE

megkapják. ; A. Mizuike: Enrichment Techniques for Inorganic Trace Analysis, Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg-New York, 1983. Ajánlott irodalom: Z. Fang: Flow Injection Atomic Absorption Spectrometry, Wiley, 1995.; F. Macásek, J.D. Navratil: Separation Chemistry, Ellis Horwood, New York, London, 1992.; Flow Injection Atomic Spectroscopy, ed. by J.L. Burguera, Marcell Dekker Inc., New York, Basel, 1989.; Inczedy J.: Ioncserélők analitikai alkalmazása, Műszaki Könyvkiadó, 1962

KÉM/91 Sűrűségfüggő módszerek az elektronszerkezet leírására

Ángyán János (University of Henry Poincaré, Nancy, France)

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételt

Funkcionálszámítás alapjai. Elektronsűrűség és pársűrűség fogalma; kicserélődési-korrelációs lyuk. Sűrűségfüggők néhány egyszerű rendszerre (elektron-gáz, H és He atom). Hohenberg-Kohn tételek. Thomas-Fermi módszer. Kohn-Sham elmélet. Kicserélődési és korrelációs (xc) funkcionál. A lokális sűrűség közelítés. Általánosított gradiens közelítés. Adiabaticus csatolás módszere. Pályafüggő funkcionálok. A Kohn-Sham módszer gyakorlati határai. Új irányzatok a sűrűségfüggők továbbfejlesztésére. Konceptuális DFT.

KÉM/92 Vákuumtechnika

[Frigyes Dávid – FRDKAAT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételt

A tantárgy megismerteti a hallgatókat a vákuumtechnika alapvető elméleti és gyakorlati vonatkozásaival. Főbb témakörök: a vákuumtechnika története; a vákuum definíciói;

elméleti alapok (kinetikus gázelmélet, ütközési számok, gázok hő- és elektromos vezetése, transzportfolyamatok), vákuum-kompatibilis (és -inkompatibilis) anyagok, vákuumszivattyúk, vákuummérők, vákuumrendszerek, szabványok, hibakeresés

Kötelező irodalom:

A hallgatók az órai anyagot megkapják:

<http://www.chem.elte.hu/departments/altkem/vakuumtechnika/>

Ajánlott irodalom:

S. Dushman A vákuumtechnika tudományos alapjai, Akadémiai Kiadó, Budapest 1959..

KÉM/93 Elemi és alkalmazott kvantumkémia

[Szabados Ágnes SZAKADT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételt

A tárgyat azok számára hirdetjük, akik a Kémia Doktori Iskolába való beiratkozást megelőzően nem tanultak elemi kvantumkémia. Tipikusan külföldi hallgatók igényeihez illeszkedik, angolul és franciául érhető el.

KÉM/94 Proteome Analysis and Protein Structure

[Mező Gábor MEGLABT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételt

Proteome Analysis and Protein Structure.

KÉM/95 Alkalmazott elektrokémia előadás

Lakatosné Varsányi Magda LAJMAAE.ELTE

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételt

Az előadás programja (két óra/hét) összefoglalja az elektród-folyamatok és a passziválódás elméleti alapjait, valamint az elektrokémia egyen és váltóáramú vizsgálati módszereit. Bemutatja az elektrolízis általános alapelveit, az elektrokémiai fémmegmunkálás valamint a katódos fém és ötvözetleválasztás elméletét. Példákkal illusztrálja az elektrokémiai eljárások alkalmazását a nanotechnológiai kutatásokban.

EÖTVÖS LORÁND TUDOMÁNYEGYETEM - TERMÉSZETTUDOMÁNYI KAR
KÉMIA DOKTORI ISKOLA KÉPZÉSI TERVE

Tematika:

- Kémiai és elektrokémiai folyamatok egyensúlya
- Elektrod-folyamatok kinetikája. Átlépési polarizáció. Diffúziós túlfeszültség.
- Passzíválódás. A passzív állapot kialakulása anódos polarizációval és oxidálószer hatására. A filmképződés mechanizmusa, A passzív réteg vizsgálata nemelektrokémiai módszerekkel.
- Egyen és váltóáramú kísérleti módszerek. Az elektrokémiai eljárások alkalmazása a nanotechnológia, és a szenzorfejlesztés területén.
- Elektrolízis. Galvanikus fémleválasztás egyen és pulzáló árammal. A fémleválasztást befolyásoló paraméterek. Az ötvözetleválasztás elméleti alapjai. Árammentes fémleválasztás. A fémleválasztás környezetszennyező hatásai.
- Nanoszerkezetű vékonyrétegek (mono és multi rétegek) előállítás nem-stacionárius elektrokémiai eljárással
- Kémiai áramforrások. Tüzelőanyag elemek

KÉM/96 Fotofizika és fotokémiai kinetika

[Demeter Attila DEAMAAE.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételt

Fotofizika és fotokémiai kinetika” speciálkollégium az elemi reakciókinetika és a fotokémia alapfogalmainak ismertetése után, a szerves vegyületek fotokémiáját dolgozza fel a kinetikai tulajdonságok megismerésére helyezve a hangsúlyt. Bemutatja a preparatív szerveskémiai, valamint a kinetikai vizsgálatokban használt eljárásokat, így a fluoreszcenciás színekélemezést és a különböző időfelbontott módszereket is. A fotofizikai tárgyú órák után, a fotokémia jellegzetes reakció típusai kerülnek tárgyalásra, miközben az egyes témakörökhöz kapcsolódó reprezentatív vizsgálatsorozatok bemutatására is sor kerül. Kitekintésképpen diszkutálásra kerülnek olyan összetett rendszerek is, amelyekben a fotokémiának fontos a szerepe: például a légkörkémiai, vagy egyes biológiai-élettani jelenségek.

KÉM/97 Sokváltozós statisztikai módszerek II. Paraméterbecslés

Szepesváry Pál – SZPLAAT.ELTE

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételt

Modellek és modellek paraméterei. Lineáris, paraméterekben lineáris, nem lineáris modellek, A paraméterbecslés legkisebb négyzetes módszere. Sokváltozós lineáris súlyozatlan és súlyozott paraméterbecslés. A regresszió diagnosztikája. Modell- és esetjóságot jellemző mennyiségek. Regresszió rosszul kondicionált esetekben. Ridge regresszió, főkomponens regresszió, parciális legkisebb négyzetes (PLS) paraméterbecslés. Nemlineáris modellek. Paraméterbecslési lehetőségek, algoritmusok.

KÉM/98 Ciklodextrinek, mint a szénhidrátalapú nanotechnológia sokoldalú képviselői

Szente Lajos - SZLQAAT.ELTE

[Fenyvesi Éva -](#)

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételt

A ciklodextrinek az innovatív gyógyszerformulázás kedvelt segédanyagai, különleges szupramolekuláris szerkezetek alapanyagai, a királis elválasztások legfontosabb szelektorai. Vizes oldataik a zöldkémia elfogadott oldószerei. Ma már a legtöbb nagy gyógyszergyár formulázási protokolljában szerepel a ciklodextrines komplexálás. Az analitika, különösen a királis elválasztások területén szinte megkerülhetetlen a ciklodextrinek alkalmazása. A tervezett előadások ezeken a tématerületeken mutatják be a tájékozódáshoz szükséges alapismereteken kívül a kutatások legújabb eredményeit.

Az egyes előadásokat az adott szakterület legjobb ismerői tartják (Dr. Csemesz

EÖTVÖS LORÁND TUDOMÁNYEGYETEM - TERMÉSZETTUDOMÁNYI KAR
KÉMIA DOKTORI ISKOLA KÉPZÉSI TERVE

Ferenc, Dr. Fenyvesi Éva, Horváthné Dr. Otta Klára, Dr. Iványi Róbert, Dr. Jicsinszky László, Dr. Kolbe Iлона, Dr. Puskás István, Dr. Sente Lajos).

Az előadások helyszíne megbeszélés szerint az ELTE TTK valamelyik terme vagy a CYCLOLAB Kft. (IX. Illatos út 7.) tanácsterme.

KÉM/099 Számítógépes gyógyszertervezés

Keserű György Miklós - KEGRAAT.ELTE

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételt

A tárgy célja, hogy szemléletformáló jelleggel megismertesse a hallgatókat a számítógéppel segített gyógyszertervezésben 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 az alábbi témaköröket fogja át: 1. Bevezetés a gyógyszerkutatóba. A gyógyszertervezés fejlődése napjainkig. (2h); 2. Molekulaszerkezeti modellek építése számítógéppel. A molekula geometriai alapfogalmak és sztereokémiai matematikai leírása. A molekula mechanika elméleti alapjai. A molekula mechanikai alapegyenletei, az energia számítás részletei. (4h); 3. Bevezetés az erőter alapú konformációs analízisbe (4h); 4. Hatás-szerkezet összefüggés vizsgálatok 1. QSAR-modellek (Free-Wilson analízis, Hanch analízis, COMFA analízis) (4h); 5. Hatás-szerkezet összefüggés vizsgálatok 2. Szerkezet alapú tervezés, dokkolás ADME paraméterek számítása (4h); 6. Hatás-szerkezet összefüggés vizsgálatok 3. Virtuális szűrővizsgálatok a gyógyszerkutatóban (4h); 7. Gyakorlati bemutató: QSAR modellek alkalmazása a modern gyógyszerkutatóban. Dokkoló programok. Virtuális szűrés (4h)

KÉM/100 Lecture Series in English

[Inzelt György – INGKAAT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételt

Külföldi előadók által tartott előadássorozat.

KÉM/101 Biomolekulák tömegspektrometriás vizsgálata

[Szabó Pál – SZPOAAT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételt

A tárgy célja megismertetni a hallgatókkal a biomolekulák vizsgálatát lehetővé tevő tömegspektrometriás módszereket, technikákat, a mintaelőkészítési eljárásokat, a mikromennyiségek kromatográfiás elválasztási illetve tisztítási lehetőségeit. Gyakorlati példákon keresztül bemutatásra kerül a legfontosabb biomolekulák (fehérjék, nukleinsavak, szénhidrátok, lipidek, vitaminok) móltömegmeghatározása, szerkezetazonosítása, illetve mennyiségi meghatározása. A mennyiségi meghatározások kapcsán tárgyalásra kerülnek a különböző célmolekulák (gyógyszermolekulák, metabolitok, narkotikumok, dopingszerek) biológiai mátrixokból történő meghatározásának lehetséges módjai. Szó lesz továbbá az analitikai módszerek validálásáról is.

KÉM/102 NMR spektroszkópia elmélete és mérés technikája

[Rohonczy János – ROJKABT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételt

KÉM/103 Szilárd anyagok NMR spektroszkópiája

[Rohonczy János – ROJKABT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételt

1. A magspin-kölcsönhatások fajtái. Jellegzetes energia-átmenet tartományok
2. Kölcsönhatási tenzorok tulajdonságai

EÖTVÖS LORÁND TUDOMÁNYEGYETEM - TERMÉSZETTUDOMÁNYI KAR
KÉMIA DOKTORI ISKOLA KÉPZÉSI TERVE

- Euler szögek, forgatások definíciói
Irreducibilis szferikus tenzor-reprezentáció, Wigner féle rotációs mátrix szerepe
3. A kémiai árnyakolás anizotrópiájának mérése
Egykristály NMR, a CSA (\rightarrow , \leftarrow) szögfüggése
Porspektrumok kiszélesedése, CSA
 4. Mágikus szög körüli forgatás (MAS)
A CSA hatása a MAS spektrumra, forgási oldalsávok
Mérőfej geometriája, a mintatartók és turbinák szerkezeti anyagai
 5. Keresztpolarizációs kísérletek (CP)
Pulzusprogram, változatok
Hartmann-Hahn rezonanciafeltétel spintermodinamikai értelmezése
Kontaktidő optimalizálásának szempontjai. TOSS és SELTICS szekvenciák.
 6. A dipoláris csatolás természete
Dipoláris csatolás \rightarrow -szögfüggése egykristályban
Dipolárisan csatolt 1/2 spinű magok porspektruma
 7. Forgatás spin-térben
WAHUA, MREV-8, BR-24 szekvenciák.
Lee-Goldburg lecsatolás elve. FSLG és PMLG változatok.
 8. Kvadrupólus csatolás természete
Kvadrupólus aktív magok
Kvadrupólus csatolási állandó és kvadrupólus frekvencia paraméterei
Kvadrupólus kölcsönhatás Hamilton operátorának szferikus tenzor-reprezentációja
 H_q első rendben, és annak \rightarrow szerinti szögfüggése
 H_q második rendben. Szimmetrikus átmenetek \rightarrow szerinti szögfüggése
Kvadrupólus izotróp shift, központi átmenet tipikus jelalakja
 9. DOR spektroszkópia
A másodrendű kvadrupólusfrekvencia szögfüggése és a DOR kapcsolata
A mérőfej szerkezete, a módszer előnyei, hátrányai
 10. DAS spektroszkópia
DAS pulzusprogram. DAS mérőfej szerkezete
A $P_2(\rightarrow)$ és $P_4(\rightarrow)$ Legendre polinomok alakja, és grafikus megjelenítésük
A DAS echo megjelenésének mérés-technikai feltétele
A 2D DAS spektrum elvi magyarázata a *projection cross-section* elv alapján
A *shearing* transzformáció célja, megvalósításának változatai
 11. MQMAS
Pulzusprogram. A kvadrupólus-echo megjelenésének mérés-technikai feltétele
A koherencia-útvonalválasztás szerepe a kvad-echo kialakulásában.
A kvadrupólus izotróp shift megjelenése az F2 és F1 tartományokban.
Frekvenciatengely skálázása F1-ben.
MQMAS változatok, előnyeik
 12. STMAS
Az 1D MAS CT és ST jelek megjelenése,
A forgási oldalsávok összevonásának kísérleti feltételei
A 2D kvadrupólus-echo megjelenésének mérés-technikai feltétele
A koherencia-útvonalválasztás szerepe a kvad-echo kialakulásában.
Az ST-CT és CT-CT korrelációsjelek közötti különbség jellemzése
STMAS változatok, előnyeik
 13. Dupla-rezonancia kísérletek
A SEDOR elve, pulzusprogramja
A dipoláris-csatolás frekvenciájának atom-atom távolságfüggése
A REDOR elve, pulzusprogramja, a REDOR jel \rightarrow -paramétertől való függése.
A \rightarrow és az atom-atom távolság kapcsolata

EÖTVÖS LORÁND TUDOMÁNYEGYETEM - TERMÉSZETTUDOMÁNYI KAR
KÉMIA DOKTORI ISKOLA KÉPZÉSI TERVE

14. A legfontosabb szilárd NMR-el vizsgálható magfajták
 ^{29}Si ; ^{27}Al , ^{17}O : Spin, izotópgyakoriság, érzékenység, T_1 relaxációs idő
A legismertebb kémiai eltolódástartományok
A CP-MAS alkalmazásának lehetőségei
Jellegzetes minta-fajták
Izotóp-dúsítás szükségessége, tipikus módjai
Egyéb jól mérhető magfajták: ^{23}Na , ^{11}B , ^{31}P , ^{87}Rb
Kevésbé mért magfajták: ^{14}N , ^{25}Mg , ^{33}S , ^{35}Cl , ^{39}K , ^{89}Y , ^{109}Ag stb.
Spin, izotópgyakoriság, érzékenység, T_1 relaxációs idő
Kvadrupólus csatolás mértéke
A legismertebb kémiai eltolódástartományok, példák
15. Fontos 1/2 spinű magok: ^1H , ^{19}F , ^{13}C , ^{15}N , ^{77}Se , ^{117}Sn , ^{195}Pt , ^{203}Tl , ^{207}Pb
Izotópgyakoriság, érzékenység, T_1 relaxációs idő
A legismertebb kémiai eltolódástartományok, példák

KÉM/104 A fehérjekrisztallográfia módszerei

[Harmat Veronika – ROJKABT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételt

A kurzus a makromolekulák röntgendiffrakciós szerkezet-meghatározásának módszereit gyakorlati megközelítésben tárgyalja.

I. Elméleti alapok. A módszer lehetőségei és korlátai. Az elektronsűrűségi függvény és a szerkezeti tényező viszonya.

II. Kristályosítási és adatgyűjtési módszerek és stratégiák

III. A fázisprobléma megoldása.

IV. Az elektronsűrűségi térképtől a molekula térszerkezetéig

V. A szerkezet validálása, hibaforrások a szerkezetmegoldás során,

Új irányzatok és kihívások a fehérjekrisztallográfiában. Alkalmazások a gyógyszertervezésben. Membránfehérjék szerkezetvizsgálata. Időfelbontásos krisztallográfia

KÉM/105 Szilíciumorganikus kémia

[Szalay Roland – SZRKABT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételt

A Si-atom bevitelének hatása a szerves vegyületek fizikai és kémiai tulajdonságaira. A szilícium-szén-, ill. a szilícium-heteroatom-kötés természete. A Si-organikus vegyületek előállításának általános módszerei. A fontosabb Si-organikus vegyületszoportok (szilánok, halogeno-szilánok, sziloxánok, szilatiánok, szilazánok, szilil-fémek, stb.) szerkezetének és reakciókészségének tárgyalása. Reaktív Si-vegyületek (szililének és származékai) előállítása, szerkezetvizsgálata, jellemző reakcióik bemutatása. Poli-szilánok, ill. -karbaszilánok kémiája. Szerves vegyületek Si-származékainak jelentősége a szerveskémiai szintézisekben: a szilil-csoport, mint védő-, ill. aktiváló csoport. Kemo-, regio-, ill. sztereoselektív szililezési eljárások. A Si-organikus vegyületek alkalmazása az anyagtudományokban. A szilszeszkvioxánok jelentősége. Bevezetés a bioszilíciumorganikus kémiába. Si-tartalmú gyógyszerek.

KÉM/106 Elméleti Szerves Kémia II.

[Hajós György – HAGMAAE.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételt

KÉM/107 Szerves és biomolekuláris kémia újabb eredményei

[Hajós György – HAGMAAE.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételt

KÉM/108 A biológiai fehérjeszintézis kémiája

[Gáspári Zoltán – GAZKACT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételhető

A kurzus célja: a biológiai rendszerekben zajló peptid- és fehérjeszintetikus folyamatok (transzláció, nemriboszomális peptidszintézis) ismertetése az alapképzésnél lényegesen mélyebb szinten, a legmodernebb, elsősorban szerkezeti eredmények bemutatásával, értelmezésével és összefüggéseik megvilágításával. A kurzust elvégző hallgatók betekintést kapnak a korszerű szerkezetvizsgáló módszerek segítségével elérhető biokémiai jellegű ismeretekbe konkrét, biotechnológiai és gyógyászati szempontból is lényeges tématerület kapcsán. Természetesen a szerkezeti eredményeket a kapcsolódó kémiai, biokémiai jellegű vizsgálatok eredményeivel kiegészítjük. A kurzust felvevő hallgatók: A Kémia Doktori Iskola minden érdeklődő hallgatója, különösen ajánlott a biológiához, biokémiához vagy peptidkutatáshoz, valamint szerves reakciómechanizmusok vizsgálatához kötődő területeken dolgozók számára Szükséges előismeretek: elsősorban a biokémiai (pl. Biokémia c. tárgy) illetve makromolekuláris szerkezetvizsgáló módszerekkel (NMR-spektrószkópia, röntgenkristallográfia) kapcsolatos előismeretek A kurzus menete és értékelése: A félév során a tematikában érintett témakörök részletes megbeszélése, több alkalommal számítógépes térszerkezetmegjelenítéssel segítve Osztályzat: a félév végén 5 oldalas, kötött formátumú dolgozat írása az oktatóval előre egyeztetett témából és forrásokból Tervezett tematika: 1.A transzláció és a nemriboszomális fehérjeszintézis elhelyezése a sejt biokémiai rendszerében 2.A nemriboszomális fehérjeszintézis részletei: enzimek, reakciómechanizmusok, termékek 3.Az RNS-molekulák térszerkezeti és katalitikus tulajdonságainak áttekintése példákkal 4.A hírvívő RNS jellemzése:, az illesztés (splicing) mechanizmusának és a résztvevő faktoroknak részletes bemutatása 5.A riboszóma és alkotórészeinek részletes bemutatása az új, atomi szintű térszerkezeti adatok alapján 6.A transzláció iniciációja I. Inicáció prokarióta rendszerekben 7.A transzláció iniciációja II. Inicációs mechanizmusok eukariótákban 8.A kodonfelfismerés mechanizmusa, a pontos transzláció biztosítása 9.A szelenocisztein és a pirrolizin beépülése 10.A polipeptidlánc elongációja, a peptidkötés kialakulása 11.A transzláció mechanizmusa, az ehhez szükséges fehérjefaktorok működése 12.A peptidszintézis terminációja, a polipeptidlánc hirtoldízisének mechanizmusa 13.A fehérjeszintézist gátló antibiotikumok hatásmechanizmusa 14.A születő polipeptidlánc feltekeredése (kotranszlacionális folding), valamint szignálszekvenciák hatására bekövetkező események transzláció közben (pl. membránfehérjék szintézise)

KÉM/109 Szerves makromolekulák hőbomlása

[Blaszó Marianne – BLMLAAT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételhető

Hő hatására bekövetkező kémiai reakciók szerves anyagokban. Szintetikus polimerek hőbomlási folyamatai (poliolefinok, vinil polimerek, PVC, gumik, poliéterek, poliészterek, poliamidok, poliuretánok, fenolgyanta, epoxi gyanták, szilíciumorganikus polimerek). Fa és mezőgazdasági melléktermékek (biomassza) természetes polimer összetevőinek (cellulóz, lignin) hőbomlása. Szerves makromolekuláris anyagok az ipari, és kommunális hulladékokban. Pirolízis alkalmazása hulladékok hasznosítására.

Műanyag és biomassza hulladékok hőbomlástermékeinek katalitikus átalakítása. Ásványi szén- és kőolaj feldolgozóipari melléktermékek hőbomlása és katalitikus átalakítása. Ajánlott szakirodalom: Feedstock Recycling and Pyrolysis of Waste Plastics, J. Scheirs, W. Kaminsky (Editors), John Wiley, 2006

KÉM/110 Sztochasztikus folyamatok a fizikai kémiában

[Schiller Róbert – SCRHAAT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételhető

Témavázlat: - Ingadozási jelenségek az időben o Autokorrelációs függvények o Nyquist zaj o Onsager-féle reciprocitási reláció o Transzportegyütthatók és regressziós hipotézis o Fluktuáció-diszipáció tétel - Stochasztikus folyamatok matematikája o Markov-folyamatok o Vezéregyenlet és Fokker-Planck egyenlet o Kémiai kinetikai alkalmazások - Diffúzió és Brown-mozgás o Bolyongás o Langevin-egyenlet

KÉM/111 Elektrokémiai kísérleti módszerek elméleti háttere II.

[Láng Győző – LAGKAAT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételhető

Az elektromosan polarizálható határfelületek termodinamikája. A szakirodalomban található elméletek kritikai tárgyalása. Elektrodok felületi feszültségének meghatározására alkalmazott módszerek elméleti alapjai folyadék/folyadék és szilárd/folyadék határfelületek esetén. A különféle módszerekkel mért adatok feldolgozásával és értékelésével kapcsolatos problémák: piezoelektromos módszer, extenzométer, "bending beam" módszer, különféle interferometriás módszerek, stb. Vékony rétegek és filmek mechanikai tulajdonságainak in situ vizsgálatára alkalmazott elektrokémiai módszerek. Vezető polimerek és kompozit rétegek elektrokémiai és mechanikai tulajdonságainak, degradációjának vizsgálatára alkalmas módszerek elméleti háttere. A tárgyalt rendszerek elektrokémiai tulajdonságait leíró összefüggések, matematikai és fizikai modellek.

KÉM/112 A Monte Carlo számítógépes szimulációs módszer

[Jedlovsky Pál – JEPLAAT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételhető

1. A számítógépes szimulációk statisztikus mechanikai alapjai. Boltzmann eloszlás, állapotösszeg 2. Kanonikus (N,V,T) Monte Carlo szimuláció, Boltzmann- mintavételezés 3. Monte Carlo szimuláció izoterm-izobár és nagykanonikus sokaságon 4. Fázisegyensúlyok szimulációja, a Gibbs Monte Carlo módszer 5. A szimulációk technikai kérdései. Energiaszámítás, potenciál- modellek, párkorrelációs függvények, periodikus határfeltételek, távoli részecskék kölcsönhatása... 6. Molekuláris rendszerek szimulációja. Reakciótér-korrekció molekuláris rendszerekre 7. A molekulák polarizációjának számítása a szimuláció során 8. Irányított (nem-Boltzmann) mintavételezések 9. A fordított (Reverse) Monte Carlo (RMC) módszer 10. Szabadenergia számítása Monte Carlo szimulációval

KÉM/113 Molekuláris felismerés alapjai

[Kele Péter – KEPEACT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, választható, nem ismételhető

A fluoreszcencia alapjai Fluorofórok (szerves, szervesetlen, természetes –GFP)

EÖTVÖS LORÁND TUDOMÁNYEGYETEM - TERMÉSZETTUDOMÁNYI KAR
KÉMIA DOKTORI ISKOLA KÉPZÉSI TERVE

Molekuláris felismerés belső-töltésátviteli (ICT) szenzorokkal Fotoindukált elektrontranszfer (PET) szenzorok Excimer és energiáttranszfer (FRET) rendszerek Cukrok, aminosavak, nukleotidok felismerése Nanorészecskék alkalmazása Királis felismerés Peptidek, nukleinsavak (molecular beacons) Logikai kapcsolók

KÉM/ÁH-KV Áthallgatás, kreditátvitel

Áthallgatással maximum a tanulmányi kreditek 30 %-a szerezhető meg, míg kredit átvitellel maximum 50 %.

Kutatási modul (megszerezhető kredit: 156):

KÉM/KUT Irányított kutatómunka (megszerezhető kredit 24/I-II.tanév, 27/5-6. szemeszter)

1 kredit/30 hallgatói tanulmányi munkaóra, doktori kutatás, választható, nem ismételhető

Az irányított kutatómunka a témavezető irányításával folytatott kutatás. Kutatási munkával összesen 156 kutatási kredit szerezhető. Az I-IV. félévben félévenként 24 (összesen 96), a III. évben 2 x 27, azaz 54 kredit szerezhető amennyiben a hallgató a javasolt tanulmányi előmenetelt követi.

KÉM/BESZ Beszámoló (megszerezhető kredit: 6)

6 kredit, választható, nem ismételhető

A 3. félévi beszámolónapon tartott előadás kreditértéke: 6 kredit.

EÖTVÖS LORÁND TUDOMÁNYEGYETEM - TERMÉSZETTUDOMÁNYI KAR
KÉMIA DOKTORI ISKOLA KÉPZÉSI TERVE

VI. Értékelési, ellenőrzési szabályok:

Egy heti 2 órás előadáson való részvétellel, felkészüléssel és sikeres vizsgával 3 kredit szerezhető. A képzés 6 féléve során minden hallgatónak legalább 24, kontaktóra hallgatásáért kapott kreditet kell megszereznie. A kurzusok teljesítését a tárgy előadója ötfokozatú (1-2-3-4-5) skálán értékeli és a hallgató indexében, valamint az ETR rendszerben igazolja.

Ezt lehetőleg az első 4 félévben kell elérni. Az 1-4 szemeszterben 1-1 előadás felvétele kötelező, kivéve ha a 2. évig már megszerezte az összes kötelező kreditet vagy méltánylást érdemlő okból halasztást kapott.

Egy órás előadás, speciális kollégium, vendégelőadói kurzus vagy más intézménynél végzett tanulmányok esetén a kreditszámot egyedileg határozza meg a Doktori Iskola Tanácsa, a benyújtott tematika, engedélykérés alapján a tárgy felvételekor.

Áthallgatással maximum a tanulmányi kreditek 30 %-a szerezhető meg, míg kredit átvittel maximum 50 %.

Az irányított kutatómunka a témavezető irányításával folytatott kutatás. Kutatási munkával összesen 156 kutatási kredit szerezhető. Az I-IV. félévben félévenként 24 (összesen 96), a III. évben 2 x 27, azaz 54 kredit szerezhető amennyiben a hallgató a javasolt tanulmányi előmenetelt követi.

A kutatási tevékenységet a témavezető háromfokozatú skálán (kiválóan megfelelt – megfelelt – nem felelt meg) értékeli. A kutatásteljesítmény kredites értékelését a témavezető javaslata alapján a programvezető adja és írja alá a leckeönyvben.

A 3. félévi beszámolónapon tartott előadás kreditértéke: 6 kredit.