

## Kémia Doktori Iskola

### Témavezető

### A kutatási téma címe

Baranyai András	A vízmolekula klasszikus modelljének fejlesztése és alkalmazása számítógépes szimulációkban
Bencs László	Grafitkemencés atomforrásban elpárologtatott anyagok spektrumának tanulmányozása
Bencs László	Szilárdmintás grafitkemencés atomabszorpciós módszerek kifejlesztése holografikus kristályok közvetlen elemzésére
Bencs László	Párolgási- és atomizációs mechanizmusok vizsgálata spektrokémiai sugárforrásokban
Bencze László	Al-ot, Cu-et, Ag-öt, Sn-t, Sb-t tartalmazó binerés terner ötvözetek elegyedési termodinamikai adatainak meghatározása Knudsen-effúziós tömegspektrometriás módszerrel
Besenyey Gábor	Szerkezeti és kémiai vizsgálatok N-klór-arénszulfonamidátok körében
Blaszó Marianne	Halogén- és nitrogéntartalmú szintetikus polimerek környezetre ártalmas hőbomlástermékei. Műanyag-hulladékok veszélyes pirolízistermékeinek kémiai átalakítása
Bősze Szilvia	Mycobacterium tuberculosis fertőzés korai kimutatására és a kezelés hatékonyságnak követésére alkalmas diagnosztikai reagensek fejlesztése
Bősze Szilvia	A Mycobacterium tuberculosis fertőzés hatékony célzott terapiájára alkalmas antituberkulotikum konjugátumok tervezése, szintézise és biológiai aktivitásának vizsgálata
Csámpai Antal	C2-szimmetriával rendelkező hatékony királis ligandumok és katalizátorok: szintézis, szerkezet, reaktivitás
Csámpai Antal	Újtípusú királis kondenzált poliheterociklusok előállítás
Csámpai Antal	Heterociklusos ferrocének és áthidalt származékaik szintézise, szerkezetvizsgálata és molekuladinamikája
Császár Attila	Biomolekulák elméleti szerkezetvizsgálata

Császár Attila	Ab initio termokémia
Császár Attila	Molekulaszínképek nagy pontosságú kvantummechanikai számítása
Csempesz Ferenc	Kolloid gyógszerhordozók stabilitása
Csörgeiné Kurin Krisztina	Nemlineáris kémiai jelenségek tanulmányozása
Deckerné Majer Zsuzsanna	Peptidek és fehérjék UV-fénnyel történő kölcsönhatásának vizsgálata, aromás aminosavak szerepe. Peptidmodellek szintézise, szerkezetvizsgálat
Deckerné Majer Zsuzsanna	Átmeneti fémek biomolekulákkal alkotott komplexeiknek előállítása, azonosítása és vizsgálata spektroszkópiai módszerekkel
Demeter Attila	Erős hidrogén-kötés kialakulásának hatása szerves molekulák spektroszkópiájára és fotokémiai viselkedésére
Dibó Gábor	A mikrohullámmal kiváltott peptidszintézis metodikai problémái
Dibó Gábor	Glikokonjugátumok előállítása mikrohullámmal kiváltott szintézisek segítségével
Drahos László	Bioinformatikai eszközök fejlesztése és alkalmazása biokémiai problémák megoldására
Farkas Ödön	Konformációs analízis eljárás fejlesztése
Farkas Ödön	3D-QSAR módszer fejlesztése, validálása
Farkas Ödön	Inverz-QSAR eljárás alkalmazása peptidek és egyéb flexibilis molekulák biológiailag aktív konformációjának meghatározására
Farkas Ödön	Szerves kémiai reakciók vizsgálata kvantumkémiai módszerekkel
Fekete Jenő	Szuró (screening) módszer kidolgozása HPLC, CE, GC és NMR módszer felhasználásával
Fekete Jenő	EDTA és esetleges metabolitjainak meghatározása
Fodor-Csorba Katalin	Folyadék-kristályok szintézise és tulajdonságaik vizsgálata
Fogarasi Géza	Molekulakonformációk és rezgési spektrumok kvantumkémiai számítása
Gáspári Zoltán	Fehérjeszerkezetek vizsgálata bioinformatikai módszerekkel
Gáspári Zoltán	Fehérjék feltekeredésének NMR-spektroszkópiai vizsgálata
Gilányi Tibor	"Polimerek és polielektrolitok kölcsönhatása tenzidekkel oldatban és határfelületeken
Hajós György	Új ciklizációs reakciók N-heteroaromás származékok körében

Harmat Veronika	Makromolekuláris komplexek szerkezetfelfedezése
Harmat Veronika	Fehérjekristallográfia
Hollósi Miklós	"Membránpermeábilis peptidok és oligonukleotid komplexek spektroszkópiai és biológiai vizsgálata
Hollósi Miklós	Foszforsav-alapú királis koronaéterek és komplexek vizsgálata
Homonnay Zoltán	Vaskomplexek szerkezetének és reakcióinak Mössbauer-spektroszkópiai vizsgálata megfagyasztott oldatokban
Horvai György	Elektroanalitika, elválasztástechnika, határfelületek
Horváth István Tamás	Fenntartható fejlődés kihívásai: társadalom, energia, széntartalmú termékek és a környezet szennyezés megelőzése
Horváth István Tamás	Megújuló alapanyagok fenntartható átalakítása
Horváth István Tamás	Kétfázisú katalizátorok alkalmazása szerves szintézisekben
Horváth István Tamás	Zöld kémiai reakciók alkalmazása
Horváth István Tamás	Fémorganikus reakciók mechanizmusának vizsgálata in situ spektroszkópiai módszerekkel
Hudecz Ferenc	A poliovírus sejtbejutási mechanizmusának felhasználása tumorellenes szerek célbajuttatásában
Hudecz Ferenc	Biokonjugátumok és komponenseik szintézise és jellemzése
Hudecz Ferenc	Tuberkulin-specifikus szintetikus antigének előállítása és jellemzése
Inzelt György	Tüzelőanyag-cellák vizsgálata
Inzelt György	Elektroszorpciós vizsgálatok kvarckristály-mikromérleg technikával
Inzelt György	Redoxi és vezetőpolimerek elektrokémiai és elektroanalitikai alkalmazása
Inzelt György	Mikrokristályok elektrokémiája
Inzelt György	Polimerfilm-elektrodok előállítása és jellemzése
Iván Béla	Új típusú polimerizációs folyamatok és polimer rendszerek
Jalovszky István	Diaminok szintézise és reakciói
Jalovszky István	Nitrogéntartalmú heterociklusok előállítása és reakciói
Jalovszky István	Kubánvázis vegyületek szintézise és reakciói

Jalovszky István	Kalitikavázis vegyületek átrendeződési reakciói
Jedlovsky Pál	Amfipatikus molekulák viselkedésének vizsgálata számítógépes szimulációval
Jedlovsky Pál	Koromszemcsek egészségre és környezetre gyakorolt hatásának vizsgálata molekuláris szinten
Jedlovsky Pál	Biológiai membránok tulajdonságainak számítógépes szimulációs vizsgálata
Kálmán Erika	Funkcionális nanobevonatok
Kamarás Katalin	Fluoreszcens molekulákkal töltött szén nanocsövek optikai spektroszkópai vizsgálata
Kamarás Katalin	Szén nanocsövek belsejében lejátszódó kémiai reakciók tanulmányozása spektroszkópai módszerekkel
Kardos Julianna	Új célfehérjék
Kardos Julianna	Neuroprotektív molekulák tervezése és hatásmechanizmusának vizsgálata
Kardos Julianna	Serkentő és gátló aminosavak transzportja
Kele Péter	Fluoreszcens jelzővegyületek alkalmazása energiatranszfer (FRET) rendszerekben
Kele Péter	Fluoreszcens szenzorok, mint logikai kapcsolók
Kele Péter	Királis felismerés fluoreszcens szenzorokkal
Kele Péter	Fotoindukált elektrontranszfer (PET) szenzorok vizsgálata
Kerner Zsolt	Hasadványtermékek adszorpciója primer körüli szerkezeti anyagokon
Keszei Ernő	Ultragyors energia- és elektronátadás kinetikájának vizsgálata
Keszei Ernő	Nem periodikus függvények numerikus dekonvolúciója
Keszei Ernő	DNS molekulák és alkotórészeik femtokémiai vizsgálata
Kiss Éva	Rendezett, molekuláris nanorétegek kémiai felépítése, szerkezete, morfológiája
Kiss Éva	Biokompatibilis, nanoszerkezetű gyógyszerhordozók fejlesztése
Kiss Éva	Fehérjék határfelületi viselkedése egy- és kétfolyadékos rendszerben
Kiss Éva	Szilárd-folyadék kölcsönhatás szerepe polimerfelületek biokompatibilitásában
Lagzi István László	A globális klímaváltozás hatása a troposzférikus ózonra, közvetlen és közvetett hatása a vegetációra
Lagzi István László	Csapadékmintázatok képződése reakció-diffúzió rendszerekben

Láng Győző	Oxoanionok redukciójának vizsgálata elektródokon kombinált elektrokémiai módszerekkel
Láng Győző	Elektrokémiai folyamatok hatására bekövetkező mechanikai változások vizsgálata
Lugasi Andrea	elektromosan polarizálható szilárd/folyadék határfelületekben
Magyar Anna	Biológiailag aktív növényi hatóanyagok komplex vizsgálata
Magyar Anna	Fehérje alapú módszerek a Rheumatoid Arthritis kimutatására
Magyarfalvi Gábor	Opioid peptidok szerkezet-hatás közti összefüggéseinek vizsgálata
Mészáros Róbert	Molekulák mágneses jellemzőinek elméleti számítása
Mezei Pál	Polielektrolitok és tenzidok kölcsönhatása oldatfázisban
Mező Gábor	Az elektrolitkatódos, atmoszférikus ködfénykisülés (ELCAD) által emittált, atomi
Náray-Szabó Gábor	fémvonalak intenzitásait meghatározó folyamatainak vizsgálata
Náray-Szabó Gábor	Tuftsin-alapú hordozómolekulák szintézise és alkalmazása biokonjugátumok előállítására
Náray-Szabó Gábor	Fehérjekrisztallográfia
Náray-Szabó Gábor	Molekuláris elektrosztatika
Noszál Béla	Enzimreakciók kvantumkémiai modellezése
Novák Zoltán	Gyógyszerjelölt vegyületek biohasznosulását megszabó paraméterek meghatározása és
Novák Zoltán	optimalizálása mágneses magrezonanciás módszerek (NMR, MRI) integrált
Novák Zoltán	alkalmazásával
Novák Zoltán	Természetes vegyületek totálszintézise
Orbán Miklós	Dominó reakciók és tandem katalízis
Óvári Mihály	Hordozóra választott katalizátorok alkalmazása szerves szintézisekben
	Átmenetifém-katalizált reakciók vizsgálata
	Oszcilláló kémiai reakciók tervezése, előállítása, mechanizmusa és alkalmazási
	lehetőségei
	Környezeti és biológiai minták elemanalitikai vizsgálata totálreflexiós röntgenfluoreszcens
	spektrometriával és induktív csatolású plazma tömegspektrometriával

Pajkossy Tamás	Környezeti szempontból fontos elektrokémiai reakciók vizsgálata
Pápai Imre	Homogén katalitikus reakciók mechanizmusának feltárása
Pápai Imre	Aszimmetrikus szerves reakciók mechanizmusának elméleti tanulmányozása
Perczel András	Polipeptidek és fehérjék feltekeredésének kvantumkémiai vizsgálata
Perczel András	Fehérjék térszerkezetének és dinamikájának NMR-spektroszkópiai vizsgálata
	Aminosavak és aminok HPLC elemzése, eltérő származékkészítések után: reakciómechanizmus tanulmányok, egyidejű foto-diodasoros és fluoreszcenciás detektálással.
Perl Miklósné	
Perl Miklósné	A szililezés szerepe az eltérő funkciós csoportú, nagyszámú szerves vegyületet tartalmazó mátrixok elemzésében, GC-MS módszerrel
Péter László	Fémnanoszerkezetek elektrokémiai leválasztása és vizsgálata
	Elektrolitoldatok szerkezetvizsgálata diffrakciós kísérletek alapján, számítógépes (elsősorban Reverse Monte Carlo) modellezéssel
Pusztai László	Szerves fluorvegyületek szintézise
Rábai József	Nanokompozit vékonyrétegek kialakulása szerkezete és fizikai tulajdonságai
Radnóczy György	Új gyűrűzárások hetaril csoporttal szubsztituált telítetlen aldehidekkel
Riedl Zsuzsanna	Ionvezető üvegek előállítása és szerkezetvizsgálata multinukleáris szilárd fázisú NMR módszerekkel
Rohonczy János	
Rohonczy János	Molekuláris cserefolyamatok tanulmányozása dinamikus NMR spektroszkópiával és NMR spektrumokat kiértékelő program fejlesztése
	Új, bázisrészben módosított királis és akirális peptid nukleinsav (PNS) analógok szintézise és DNS-sel képzett duplexeik vizsgálata
Sági Gyula	Új L- és karbociklusos nukleozidok, mint potenciális antivirális szerek szintézise
Sági Gyula	
Salma Imre	Az ultrafinom légekőri aeroszol Budapestben
Salma Imre	A légekőri aeroszol környezeti hatásai városi és kontinentális háttérkörnyezetekben
Salma Imre	A légekőri aeroszol ülepedése
Schlosser Gitta	Tömegspektrometria, proteomikai kutatások, molekuláris kölcsönhatások vizsgálata

Sohár Pál	Heterogyűrűvel és/vagy szénhidrátokkal szubsztituált ferrocénszármazékok szintézise, spektroszkópiái (elsősorban NMR, IR és tömeg) és sztereokémiai vizsgálata
Sohár Pál	Az NMR spektroszkópia alkalmazása bonyolult telített többgyűrűs heterociklusok térszerkezetének meghatározásában, konformációanalízisében
Sólyom Sándor	Heterociklussal helyettesített 2, 3-bezodiazepinek és rokon vegyületek szintézise, valamint egyes kiinduló vegyületek új típusú előállításának tanulmányozása
Surján Péter	Nanorendszerek szerkezetének és tulajdonságainak elméleti vizsgálata
Surján Péter	Lineárisan skálázódó kvantumkémiai módszerek fejlesztése
Surján Péter	Az elektronkorrelációt figyelembe vevő eljárások fejlesztése
Surján Péter	Nanorendszerek elektronszerkezetének modellezése
Süvegh Károly	Szabadtérfogatok és másodlagos kötőerők polimerekben: pozitronannihilációs vizsgálatok és molekulamodellezés
Süvegh Károly	A szabadtérfogatok szerepe gyógyszerek szabályozott hatóanyagkibocsátásában: pozitronannihilációs vizsgálatok
Sváb Erzsébet	Boroszilikát üvegek szerkezetvizsgálata neutrodiffrakcióval
Szabados Ágnes	Az elektronkorreláció leírása multireferenciás perturbációszámítással
Szabó Dénes	Új fluororganikus vegyületek tervezése és szintézise
Szabó Rita	Tumor- és parazitaellenes atóanyagok, valamint polipeptid és peptid hordozót tartalmazó konjugátumaik biológiai hatásának vizsgálata
Szalai István	Mintázatképződés reakció-diffúzió rendszerekben
Szalay Péter	Kemi- és biolumineszcenciás folyamatok elméleti leírása
Szalay Péter	Kvantumkémiai számítások grides és paralel környezetben: eljárások és programok fejlesztése
Szalay Péter	Fotokémiai folyamatok elméleti modellezése
Szalay Roland	Szilíciumorganikus vegyületek alkalmazása szintézisekben és származékképzési reakciókban
Szalay Roland	Ón-, illetve vas-komplexek előállítása és koordinációs kémiai vizsgálata

Szepes László	Szerves fémvegyületek előállítása és elektronszerkezetének vizsgálata fotoionizációs módszerekkel
Szepesváryné Tóth Klára	Kémiaiilag módosított elektródok fejlesztése, alkalmazása
Szepesváryné Tóth Klára	Ionszelektív nanoszenzorok fejlesztése sejtfolyamatok tanulmányozására
Sziráki Laura	Fémfelületen kialakuló rétegek hatása az elektrokémiai/korróziós folyamatok kinetikájára
Sztáray Bálint	Fizikai fémorganikus kémia
Tarczay György	Gyökök és/vagy biomolekulák vizsgálata mátrixizolációs technikákkal
Tárkányi Gábor	A molekuláris felismerés mechanizmusának felderítése oldat- és szilárdfázisú mágneses magrezonancia (NMR) spektroszkópiával
Tárkányi Gábor	Fémkomplexek egyensúlyi folyamatainak vizsgálata mágneses magrezonancia (NMR) spektroszkópiával
Tatár Enikő	Az antimon koncentrációjának és kémiai formájának meghatározása városi aeroszolban, PET-palackokban, forgalmazott italokban és akkumulációja az emberi szervezetben
Tímári Géza	Heterociklusos vegyületek szintézise, elsősorban légzésfarmakológiai ill. belgyógyászati gyógyszerfejlesztési céllal
Torkos Kornél	Komplex analitikai módszerek fejlesztése GC, GC-MS, HPLC, HPLC-MS technikák alkalmazásával
Tóth András	Szilárdtestek részecskesugaras felületmódosítása és felületanalitikája
Tóth Gergely	Folyadékok számítógépes modellezése
Tóth Gergely	Kristálynövekedés számítógépes szimulációja
Turányi Tamás	Összetett reakciórendszerek kinetikájának vizsgálata és modellezése
Túri László	Új polarizálható víz-elektron pszeudopotenciál kidolgozása és alkalmazása kvantumdinamikai szimulációkban
Túri László	Kevert kvantumos-klasszikus molekuladinamikai módszerek fejlesztése
Túri László	Elektrontranszfer modellek: az egyszerűtől az összetettig

Uray Katalin	Mucin, immunoglobulin, hősokk- és egyéb fehérjék antigénszerkezetének felderítése, peptidszintézis szilárd hordozón. Peptidek immunkémiai vizsgálata.
Varga Imre	Többértékű ionok és amfipatikus molekulák kompetitív kölcsönhatása ellentétesen töltött polielektrolitokkal
Varga Imre	Intelligens nanokapszulák előállítása és vizsgálata
Vass Elemér	Királis szerves- és biomolekulák, valamint komplexeik rezgési és kiroptikai spektroszkópiai szerkezetvizsgálata
Vékey Károly	Glikoprotein biomarkerek keresése tömegspektrometriás módszerrel
Vértes Attila	A Mössbauer-spektroszkópia néhány biokémiai és biológiai alkalmazása
Vértes Attila	Különleges mágneses tulajdonságokkal rendelkező átmeneti fém-vegyületek vizsgálata Mössbauer-spektroszkópiával
Vidóczy Tamás	Fotokémia, fotobiológia, lézeres villanófény-fotólízis, a fotodinamiás terápiában használható fotoszenzibilizátorok minősítése, globális paraméterbecslési eljárások
Vincze Borbála	Szelektív, antitumor hatású peptidhormon dimerek, konjugátumok szintézise, kémiai jellemzése és molekuláris biológiai vizsgálata
Záray Gyula	Elem-specieszek meghatározására alkalmas HPLC / ICP-AES és HPLC / ICP-MS módszerek kidolgozása biológiai anyagrendszerekben végbemenő transzportfolyamatok vizsgálatára
Záray Gyula	Természetes biofilmek kutatása és biomonitorálási célú felhasználása
Zsély István Gyula	Reakciómechanizmusok vizsgálata és fejlesztése bizonytalanságanalízis segítségével
Zsélyné Ujvári Mária	Perklorátionok redukciójának vizsgálata ígéretes elektrokatalitikus tulajdonságokkal rendelkező fémeken
Zsigrainé Vasánits Anikó	Gázkromatográfiás – tandem tömegspektrometriás módszerfejlesztés gyógyszermaradványok meghatározására környezeti vízmintákban