

**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. Zárny Gyula](#)

**Képzési/Tanulmányi modul (megszerezendő kredit: 24):**

**KÉM/1** Komputációs statisztikus mechanika

3 kredit, elmélet, nem kötelező, nem ismételhető

**KÉM/2** Szupramolekuláris kémia

3 kredit, elmélet, nem kötelező, nem ismételhető

**KÉM/3** A tudományos kutatás módszertani és etikai kérdései

3 kredit, elmélet, nem kötelező, nem ismételhető

**KÉM/4** A clusterkémia új irányzatai

3 kredit, elmélet, nem kötelező, nem ismételhető

**KÉM/5** Szerkezeti szerves kémia haladóknak

3 kredit, elmélet, nem kötelező, nem ismételhető

**KÉM/6** Vázátrendeződések a heterociklusos kémiában

3 kredit, elmélet, nem kötelező, nem ismételhető

**KÉM/7** Kvantumkémia és szerkezetkutatás, haladóknak

3 kredit, elmélet, nem kötelező, nem ismételhető

**KÉM/8** Molekulamozgások kvantummechanikája II.

3 kredit, elmélet, nem kötelező, nem ismételhető

**KÉM/9** Kolloidális gyógyszerhordozók stabilitása

3 kredit, elmélet, nem kötelező, nem ismételhető

**KÉM/10** Makromolekulák határfelületi viselkedése

3 kredit, elmélet, nem kötelező, nem ismételhető

**KÉM/11** Elektromigrációs módszerek

3 kredit, elmélet, nem kötelező, nem ismételhető

**KÉM/12** Kvantumkémiai molekulamodellzés

3 kredit, elmélet, nem kötelező, nem ismételhető

**KÉM/13** Folyadékkristályok

3 kredit, elmélet, nem kötelező, nem ismételhető

**KÉM/14** Számítógépes kémia

3 kredit, elmélet, nem kötelező, nem ismételhető

**EÖTVÖS LORÁND TUDOMÁNYEGYETEM - TERMÉSZETTUDOMÁNYI KAR**  
**KÉMIA DOKTORI ISKOLA KÉPZÉSI TERVE**

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

**EÖTVÖS LORÁND TUDOMÁNYEGYETEM - TERMÉSZETTUDOMÁNYI KAR**  
**KÉMIA DOKTORI ISKOLA KÉPZÉSI TERVE**

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

**EÖTVÖS LORÁND TUDOMÁNYEGYETEM - TERMÉSZETTUDOMÁNYI KAR**  
**KÉMIA DOKTORI ISKOLA KÉPZÉSI TERVE**

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

**EÖTVÖS LORÁND TUDOMÁNYEGYETEM - TERMÉSZETTUDOMÁNYI KAR**  
**KÉMIA DOKTORI ISKOLA KÉPZÉSI TERVE**

- KÉM/97** Sokváltozós statisztikai módszerek II. Paraméterbecslés  
3 kredit, elmélet, nem kötelező, nem ismételhető
- KÉM/98** Ciklodextrinek, mint a szénhidrátalapú nanotechnológia sokoldalú képviselői  
3 kredit, elmélet, nem kötelező, nem ismételhető
- KÉM/99** Számítógépes gyógyszertervezés  
3 kredit, elmélet, nem kötelező, nem ismételhető
- KÉM/100** Lecture Series in English  
3 kredit, elmélet, nem kötelező, nem ismételhető
- KÉM/101** Biomolekulák tömegspektrometriás vizsgálata  
3 kredit, elmélet, nem kötelező, nem ismételhető
- KÉM/102** NMR spektroszkópia elmélete és mérés technikája  
3 kredit, elmélet, nem kötelező, nem ismételhető
- KÉM/103** Szilárd anyagok NMR spektroszkópiája  
3 kredit, elmélet, nem kötelező, nem ismételhető
- KÉM/104** A fehérjekristallográfia módszerei  
3 kredit, elmélet, nem kötelező, nem ismételhető
- KÉM/105** Szilíciumorganikus kémia  
3 kredit, elmélet, nem kötelező, nem ismételhető
- KÉM/106** Elméleti Szerves Kémia II.  
3 kredit, elmélet, nem kötelező, nem ismételhető
- KÉM/107** Szerves és biomolekuláris kémia újabb eredményei  
3 kredit, elmélet, nem kötelező, nem ismételhető
- KÉM/108** A biológiai fehérjeszintézis kémiája  
3 kredit, elmélet, nem kötelező, nem ismételhető
- KÉM/109** Szerves makromolekulák hőbomlása  
3 kredit, elmélet, nem kötelező, nem ismételhető
- KÉM/110** Sztochasztikus folyamatok a fizikai kémiában  
3 kredit, elmélet, nem kötelező, 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, nem kötelező, nem ismételhető
- KÉM/BESZ** Beszámoló (megszerezhető kredit: 6)  
6 kredit, nem kötelező, nem ismételhető

**Kurzusleírások:**

**Képzési/Tanulmányi modul (megszerzendő kredit: 24):**

- KÉM/1** Komputációs statisztikus mechanika  
[Baranyai András – BAAKABT.ELTE](#)  
3 kredit, elmélet, nem kötelező, nem ismételhető  
Termodinamikai folyamatok elméle alapjai. Statisztikus termodinamika alapjai.  
Számítási módszerek alkalmazása a statisztikus termodinamikában.
- KÉM/2** Szupramolekuláris kémia  
~~Barcza Lajos –~~  
3 kredit, elmélet, nem kötelező, nem ismételhető  
~~Molekula – kölcsönhatások elmélete, típusai. Koronaéterek. Ciklodextrinek. Kalixarének. Szerkezet és kölcsönhatási módok. Stabilitás, dinamika.~~
- KÉM/3** A tudományos kutatás módszertani és etikai kérdései

EÖTVÖS LORÁND TUDOMÁNYEGYETEM - TERMÉSZETTUDOMÁNYI KAR  
KÉMIA DOKTORI ISKOLA KÉPZÉSI TERVE

~~Beck Mihály – BEMQAAT.ELTE~~

~~3 kredit, elmélet, nem kötelező, nem ismételhető~~

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

**KÉM/4** A clusterkémia új irányzatai

~~Csákvári Béla – CSBLAAT.ELTE~~

~~3 kredit, elmélet, nem kötelező, nem ismételhető~~

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

**KÉM/5** Szerkezeti szerves kémia haladóknak

~~Csákvári Béla – CSBLAAT.ELTE~~

~~3 kredit, elmélet, nem kötelező, nem ismételhető~~

~~Szerves vegyületek térszerkezete. Összetett rendszerek. Klaszterek és a Wade-szabály.~~

**KÉM/6** Vázátrendeződések a heterociklusos kémiában

~~Csámpai Antal – CSAKAAT.ELTE~~

~~3 kredit, elmélet, nem kötelező, nem ismételhető~~

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

**KÉM/7** Kvantumkémia és szerkezetkutatás

~~Császár Attila – CSAKABT.ELTE~~

~~3 kredit, elmélet, nem kötelező, nem ismételhető~~

~~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. Diffrakációs 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 szakcikkék 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, nem kötelező, nem ismételhető~~

~~Impulzusmomentum algebra. Szimmetria: túl a pontcsoportokon. Impulzusmomentumok csatolása. Merev rotátor energiaszintjei és hullámfüggvényei. Elterések a merev rotátor modelltől. Ab initio forgási spektroszkópia. Az SQM módszer és a kvadratikus erőterek. Anharmonikus oszcillátorok, anharmonikus erőterek kvantumkémiai meghatározása. Ven Vleck perturbációszámítás. Teljes rezgési-forgási színképek 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, Molekulaszínképek és molekulaszervezet II., Akadémiai Kiadó: Budapest, 1959.

**KÉM/9** Kolloidális gyógyszerhordozók stabilitása

[Csmpesz Ferenc – CSFKAAT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, nem kötelező, nem ismételt

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 (biodegradális és nem lebontható polimerek). Emulziók (mikroemulziók, gyógyszerészeti emulziók). Stabilizálás elvi lehetőségei és gyakorlata. Liposzómák, nioszómák fizikai stabilitása, alkalmazásai. Ajánlott irodalom: Rác 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

[Csmpesz Ferenc – CSFKAAT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, nem kötelező, nem ismételt

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 polimerrétegek szerkezete, adszorbeált makromolekulák konformációja. Szegmensek térbeli eloszlása, felülethez kötött szegmenshányad, az adszorpciós réteg vastagsága. Polimer adszorpciós rétegek szerkezetvizsgálatának kísérleti módszerei. Makromolekulák kompetitív adszorpciója. Elegyadszorpciós izotermák, a preferenciális adszorpció jellemzése. Kiszorításos (displacement) adszorpció. Makromolekulás határfelületi rétegek sztérikus kölcsönhatásai. Hídkötéses, ozmotikus és szelektív flokkuláltatás, sztérikus 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, nem kötelező, nem ismételt

Az elektroforézis elmélete. Kapillár-elektroforézis. Réteg-kromatográfiás módszerek elmélete és gyakorlata. Királis elválasztás.

**KÉM/12** Kvantumkémiai molekulamodellezés

[Farkas Ödön – FAOKAAT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, nem kötelező, nem ismételt

Kvantumkémiai számítások elvégzésével megoldható problémák, a kapott eredmények várható pontosságával. Az extrapolációs kvantumkémiai 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](http://organ.chem.elte.hu/farkas/teach/Q_spec/q_spec.html) Ajánlott irodalom: Szakcikk a témában

#### **KÉM/13** Folyadékkristályok

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

3 kredit, elmélet, nem kötelező, 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., Újszász 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, nem kötelező, nem ismételhető

Főbb fejezetek: Molekuláris hiperfelületek. Molekulamechanika. A kvantumkémiai 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, nem kötelező, nem ismételhető

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, nem kötelező, nem ismételhető

A tenzidoldatok fizikai-kémiai tulajdonságai. A "hidrofób kölcsönhatás", az amfipatikus szerkezetű molekulák önszerveződésének hajtóereje. A micellaképződés klasszikus elméletei. Tömeghatás modell. Pseudo-fázisseparatorációs modell. A tenzidaggregáció kis rendszerek termodinamikai elmélete. A micellaképződés fluktuációs elmélete. Ionos micellák képződése. Az ellenion-disszociációfok problémája. A tömeghatás 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: szakcikkék 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, nem kötelező, nem ismételhető

A periciklusos reakciók osztályozása és értelmezése kvalitatív molekulapálya-elmélet segítségével. A 2-, 4- és 6-elektronos elektro ciklizációs reakciók, a szimmetria megmaradásának tétele. A 2+2 cikloaddíciók megvalósulásának lehetősége. Karbén reakciója olefinekkel. Gyökös 2+2 cikloaddíciók. Diels-Alder regio szelektivitása, a reakciópartnerek energiaigénye. 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, nem kötelező, nem ismételhető

A heteroaromaticitás fogalma, elektronhiányos és elektrontöbblettel rendelkező gyűrűrendszerek összehasonlítása. Pirazolok, diazolok, valamint oxigént és ként tartalmazó azolok és benzolólgjaik szintézise. Az öttagú heteroaromás rendszerek reakciókészsége. Piridin és benzolólgjainak szintézis-lehetőségei, különös tekintettel a modern módszerekre. Diazinok és benzolólgjaik előállítása. A hattagú heteroaromás rendszerek reakciókészsége. Hídfő-nitrogént tartalmazó kondenzált gyűrűrendszerek előállítása 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, nem kötelező, nem ismételhető

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** Sztereokémia és kiroptikai spektroszkópia

Hollósi Miklós – HOMKABT.ELTE

3 kredit, elmélet, nem kötelező, nem ismételhető

Sztereokémiai alapfogalmak. Sztereoisomerek. Szimmetria. Konfiguráció és konformáció. Sztereoisomerek elválasztása (rezolválás, racemizálás). Heterotóp ligandumok és térfelek. Kiroptikai spektroszkópia. Alkalmazott CD-spektroszkópia. Biopolimerek, CD-spektroszkópiái vizsgálatok. Vibrációs optikai aktivitás. Kötelező irodalom: Hollósi, M., Laczkó, I., Majer, Zs.: A sztereokémia 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, nem kötelező, nem ismételhető

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(kek)től könnyen elválasztható reagensek és katalizátorok 6.Zöld elválasztási módszerek 7.Szintézis oldószerek nélkül 8.Biokatalízis és biosokféleség (biodiversity) 9.A sztereokémia 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 környezeti vonatkozásai 15.A népességnövekedés környezeti 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, nem kötelező, nem ismételhető

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

**KÉM/23** Biokonjugátumok

[Hudecz Ferenc – HUFLAAT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, nem kötelező, nem ismételhető

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, nem kötelező, nem ismételhető

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 témakörhöz 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, nem kötelező, nem ismételhető

Az elektrokémia születése. Korai értelmezési problémák ( a Volta-féle fizikai és a Nernst-féle kémiai modell ). Faraday. Az elektrokémia termodinamikai megalapozása ( Gibbs ). Az elektrokémiai kettős réteg modellek változása az idők folyamán. A korai galvancelláktól a lítiumion-elemekig. A tüzelőanyag-cellák története. Az elektród folyamatok 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, nem kötelező, nem ismételhető

A standard potenciál problémája. Korszerű elektrokémiai vizsgálati technikák ( tranziens 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, nem kötelező, nem ismételhető

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, nem kötelező, nem ismételhető

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, 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 szakcikkek speciális témakörökből.

**KÉM/29** Szerves kémia haladóknak

[Jalovszky István – JAIKABT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, nem kötelező, nem ismételhető

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 (szakcikkek 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, nem kötelező, nem ismételhető

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, nem kötelező, nem ismételhető

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

**KÉM/32A** neurokémia alapjai

[Kardos Julianna – EHA.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, nem kötelező, nem ismételhető

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, nem kötelező, nem ismételhető

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, nem kötelező, nem ismételhető

Kémiai reakciók molekuláris értelmezése. Reakció-potenciálfelületek. Az átmenetiállapot-elmélet kvázi egyensúlyi 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, nem kötelező, nem ismételhető

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, nem kötelező, nem ismételhető

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, szervezetvizsgálat. 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, nem kötelező, nem ismételhető

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

**KÉM/38** Főcsoportbeli elemek fémorganikus kémiája

*Knausz Dezső – EHA.ELTE*

3 kredit, elmélet, nem kötelező, nem ismételhető

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, nem kötelező, nem ismételhető

Fémorganikus kémiai alapfogalmak, a katalízis alapjai, olefinek 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, nem kötelező, nem ismételhető

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, nem kötelező, nem ismételhető

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

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, nem kötelező, nem ismételhető

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, Mérnöktoivábbképző, 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, nem kötelező, nem ismételhető

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, nem kötelező, nem ismételhető

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, nem kötelező, nem ismételhető

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

**KÉM/47** Ciklo-és nagytagszámú peptidok szintézise

[Mező Gábor – MEGLACT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, nem kötelező, nem ismételhető

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 ciklopeptidek 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 peptidek (50-200 aminosavat tartalmazó polipeptidek, 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, nem kötelező, nem ismételhető

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 topoanalóg 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** Molekulamodellezés

*Náray-Szabó Gábor – NAGKAAT.ELTE*

3 kredit, elmélet, nem kötelező, nem ismételhető

Az előadásban áttekintést adunk a molekulamodellezési 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 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, nem kötelező, nem ismételhető

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, nem kötelező, nem ismételhető

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, nem kötelező, nem ismételhető

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 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, nem kötelező, nem ismételhető

A kromatográfiás 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 kromatografiája. 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, nem kötelező, 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 erőterek 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, nem kötelező, 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 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 belefoglalása 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, nem kötelező, nem ismételhető

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

**KÉM/57** Szerves fluorvegyületek kémiája

[Rábai József – RAJKAAT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, nem kötelező, nem ismételhető

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. Biológiaiaktív 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, Lausannae 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, nem kötelező, nem ismételhető

A felületvizsgáló módszerek áttekintése a gerjesztő részecskék és a szekunder részecskék szempontjából. Elektrongerjesztés (AES, EMP, LEED, REED), ionbombázás (RBS, SIMS, SNMS) és fotonbombázás (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 Attila: Felületvizsgáló módszerek (elektronikus tananyag). Ajánlott irodalom: O. Brümmer (szerk.): Szilárd testek vizsgálata elektronokkal, ionokkal és röntgensugárzással, 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, nem kötelező, nem ismételhető

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 visszacsatolási 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, nem kötelező, nem ismételhető

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** Nagyérzékenyséű nukleáris módszerek a környezeti analitikában

[Salma Imre – SAIKAAT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, nem kötelező, nem ismételhető

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  $\gamma$ -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- $\gamma$  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 elemanalítika korszerű módszerei, szerk. Zárny, Gy., 417–505. old., Akadémiai Kiadó, Budapest, 2006. Ajánlott irodalom: Erdtmann, G. – Petri, H.: 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, nem kötelező, nem ismételhető  
Egyensúlyi statisztikus mechanika (rövid áttekintés). Irreverzibilis termodinamika (rövid áttekintés). Információ és entrópia. Fluktuációk, egyensúlyi és stacionárius folyamatok. Transzport egyenletek. Stochasztikus folyamatok, transzport együttthatók elmélete. Perkoláció

**KÉM/63** Fémkomplexek oldatreakciói és homogén katalízis

[Simándi László SILLABT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, nem kötelező, nem ismételhető  
Komplexek osztályozása. Ligandumtípusok. Egyensúlyi reakciók. A katalízis alapjai. TON, TOF.

**KÉM/64** Homogén katalízis

[Simándi László SILLABT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, nem kötelező, nem ismételhető  
Katalízis alapjai. Hidrogénezési reakciók. Katalitikus ciklus, szelektivitás. Ligandum hatása a folyamat lefutására.

**KÉM/65** Biopolimerek elméleti vizsgálata

*Simon István – SIIMAAAT.ELTE*

3 kredit, elmélet, nem kötelező, nem ismételhető  
"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 vízdoldható 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 – SOPKAAAT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, nem kötelező, nem ismételhető  
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 – SOPKAAAT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, nem kötelező, nem ismételhető  
Az NMR spektroszkópia elméleti alapjai. Fizikai alapfogalmak. A kémiai eltolódás és összetevői. Spin-spin kölcsönhatások, csatolási állandók. Elsőrendű felhasadás, multiplicitás- és intenzitás szabályok. Magasabb-rendű kölcsönhatások, távolható 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 – SUPKAAAT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, nem kötelező, nem ismételhető  
Az alapállapot meghatározása. Variációs elv, momentumok módszere. Eckart-

egyenlőtlenség. Rayleigh-Schrödinger és Brillouin-Wigner perturbációszámítás. 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-perturbációszámítás. Elektronsűrűség, Hohenberg-Kohn tétel, sűrűségmátrixok, természetes spinpályák.

**KÉM/69** Matematikai módszerek a kvantumkémiaiában II.

[Surján Péter – SUPKAAT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, nem kötelező, nem ismételhető

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, nem kötelező, nem ismételhető

Polipeptidek szerkezete, szintézise. Oldatfázisú és szilárdfázisú peptidszintézis. Peptidomimetikumok fajtái, szintézisük és felhasználásuk.

**KÉM/71** Elektrodfolyamatok kinetikája

[Szabó Kálmán – SZKKAAT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, nem kötelező, nem ismételhető

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 elektrodfolyamatok kinetikája. Az elektrodfolyamatok általános jellemzése. A különböző polarizációs fajták tárgyalása. A kettős réteg jellemzői és az elektrodfolyamatok sebessége közötti összefüggések. Az elektrodfolyamatok energetikai viszonyait leíró elméletek tárgyalása. Az elektrodfém az oldószer tulajdonságai és a folyamatok aktiválási energiája közötti kapcsolat. Az elektrodfolyamatok 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, nem kötelező, 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; energiafunkcionálok; geometriaoptimalás. Kötelező irodalom: kiadott anyag; Ajánlott irodalom: D.R. Yarkony (szerk.) Modern Electronic Structure Theory, World Scientific, 1995.

**KÉM/73** A molekuladinamika spektroszkópiai alkalmazásai

Szalay Péter – SZPKAET.ELTE

3 kredit, elmélet, nem kötelező, 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 spektroszkópiai alkalmazása

Szepes László – SZLKAET.ELTE

3 kredit, elmélet, nem kötelező, 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 – SZLKAET.ELTE

3 kredit, elmélet, nem kötelező, nem ismételhető

Az előadás során a következő tématerületek tárgyalására kerül sor: - Bevezetés és definíciók; - A fém-szén kötés; - Fontosabb ligandumok; - Osztályozás a ligandumok donor-akceptor 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, nem kötelező, nem ismételhető

Statisztikai alapfogalmak. Egy és többváltozós rendszerek általános jellemzése. Többváltozós statisztika alapjai. Alkalmazott többváltozós statisztikai példák.

**KÉM/77** Fémek korróziójának vizsgálata

Sziráki Laura – SZLKABT.ELTE

3 kredit, elmélet, nem kötelező, 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 szakkikkek 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, nem kötelező, nem ismételhető

Enantioszelektivitás, diasztereoselektivitás. 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, nem kötelező, 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, nem kötelező, 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, nem kötelező, nem ismételhető

Az energiatermelés fontosabb típusai. Az egyes energiatermelési folyamatok 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, nem kötelező, 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, nem kötelező, nem ismételhető

Reakciómechanizmusok kifejlesztése: reakciómechanizmusok előállítása kézzel és számítógépi programmal, az automatikus reakciómechanizmus-előállítás módszerei; lokális és globális érzékenységtérkép készítése, az érzékenységi együtthatók értelmezése; az érzékenységtérkép 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, nem kötelező, 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 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 szakcikkek speciális témakörökből. Ajánlott irodalom: M. P. Allem, 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, nem kötelező, nem ismételhető

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. Adiabatus és nem-adiabatus reakciódinamika. Nem-reaktív dinamika; bevezetés a transzfer folyamatok dinamikája. Kötelező irodalom: Az előadás jegyzetelt anyaga, kiadható/internetes vázlat, valamint szakcikk specális 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, nem kötelező, nem ismételhető

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 irodalmazás 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, nem kötelező, nem ismételhető

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 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, nem kötelező, nem ismételhető

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 tématerületekről. 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, nem kötelező, 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 molekulaszpektroszkópiák, valamint kromatográfiás 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, nem kötelező, 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, szerves 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, interface (összekötőelem) megoldások. Field flow fractionation (FFF): elválasztástechnika és dúsítás, elve, típusai, alkalmazási területek. Kötelező irodalom: A hallgatók az előadás anyagát Powerpoint file-ként 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** Sűrűségfacionál módszerek az elektronszerkezet leírására

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

3 kredit, elmélet, nem kötelező, nem ismételhető

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

**KÉM/92** Vákuumtechnika

*Frigyes Dávid – FRDKAAT.ELTE*

3 kredit, elmélet, nem kötelező, nem ismételhető

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, nem kötelező, nem ismételhető

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, nem kötelező, nem ismételhető

Proteome Analysis and Protein Structure.

**KÉM/95** Alkalmazott elektrokémia előadás

*Lakatosné Varsányi Magda LAJMAAE.ELTE*

3 kredit, elmélet, nem kötelező, nem ismételhető

Az előadás programja (két óra/hét) összefoglalja az elektród-folyamatok és a passzíválódás 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.

Tematika:

- Kémiai és elektrokémiai folyamatok egyensúlya
- Elektród-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, nem kötelező, nem ismételhető

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 szerveskémiaiban, valamint a kinetikai vizsgálatokban használt eljárásokat, így a fluoreszcenciás színképelemzést és a különböző időfelbontott módszereket is. A fotofizikai tárgyú órák után, a fotokémia jellegzetes reakció típusai kerülnek tárgyalásra, miközben az egyes témakörökhöz kapcsolódó reprezentatív vizsgálat sorozatok bemutatására is sor kerül. Kitekintésként diszkutálásra kerülnek olyan összetett rendszerek is, amelyekben a fotokémia fontos szerepe: például a légkörkémiái, vagy egyes biológiai-életteni jelenségek.

**KÉM/97** Sokváltozós statisztikai módszerek II. Paraméterbecslés

Szepesváry Pál – SZPLAAT.ELTE

3 kredit, elmélet, nem kötelező, nem ismételhető

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, nem kötelező, nem ismételhető

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. Csempez Ferenc, Dr. Fenyvesi Éva, Horváthné Dr. Otta Klára, Dr. Iványi Róbert, Dr. Jicsinszky László, Dr. Kolbe Ilona, Dr. Puskás István, Dr. Szente 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, nem kötelező, nem ismételhető

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 gyógyszerkutatásba. 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 gyógyszerkutatásban (4h); 7. Gyakorlati bemutató: QSAR modellek alkalmazása a modern gyógyszerkutatásban. Dokkoló programok. Virtuális szűrés (4h)

**KÉM/100** Lecture Series in English

[Inzelt György – INGKAAT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, nem kötelező, nem ismételhető  
Külföldi előadók által tartott előadássorozat.

**KÉM/101** Biomolekulák tömegspektrometriás vizsgálata

[Szabó Pál – SZPOAAT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, nem kötelező, nem ismételhető

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, doppingerek) 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, nem kötelező, nem ismételhető

**KÉM/103** Szilárd anyagok NMR spektroszkópiája

[Rohonczy János – ROJKABT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, nem kötelező, nem ismételhető

1. A magspin-kölcsönhatások fajtái. Jellegzetes energia-átmenet tartományok
2. Kölcsönhatási tenzorok tulajdonságai  
Euler szögek, forgatások definíciói  
Irreducibilis szferikus tenzor-reprezentáció, Wigner féle rotációs mátrix szerepe
3. A kémiai árnyékolás anizotrópiájának mérése  
Egykristály NMR, a CSA ( $\square$ ,  $\square$ )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 optimalálásának szempontjai. TOSS és SELTICS szekvenciák.
6. A dipoláris csatolás természete
  - Dipoláris csatolás  $\chi$ -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 tenzorrepresentációja
  - $H_q$  első rendben, és annak  $\chi$  szerinti szögfüggése
  - $H_q$  második rendben. Szimmetrikus átmenetek  $\chi$  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  $P_2(\chi)$  és  $P_4(\chi)$  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, előnyök
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, előnyök
13. Dupla-rezonancia kísérletek
  - A SEDOR elve, pulzusprogramja
  - A dipoláris-csatolás frekvenciájának atom-atom távolságfüggése
  - A REDOR elve, pulzusprogramja, a REDOR jel  $\chi$ -paramétertől való függése.
  - A  $\chi$  és az atom-atom távolság kapcsolata
14. A legfontosabb szilárd NMR-el vizsgálható magfajták
  - $^{29}\text{Si}$ :  $^{27}\text{Al}$ ,  $^{17}\text{O}$ : 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:  $^{23}\text{Na}$ ,  $^{11}\text{B}$ ,  $^{31}\text{P}$ ,  $^{87}\text{Rb}$
  - Kevésbé mért magfajták:  $^{14}\text{N}$ ,  $^{25}\text{Mg}$ ,  $^{33}\text{S}$ ,  $^{35}\text{Cl}$ ,  $^{39}\text{K}$ ,  $^{89}\text{Y}$ ,  $^{109}\text{Ag}$  stb.

- Spin, izotópgyakoriság, érzékenység,  $T_1$  relaxációs idő  
Kvadrupólus csatolás mértéke  
A legismertebb kémiai eltolódástartományok, példák  
15. Fontos 1/2 spinű magok:  $^1\text{H}$ ,  $^{19}\text{F}$ ,  $^{13}\text{C}$ ,  $^{15}\text{N}$ ,  $^{77}\text{Se}$ ,  $^{117}\text{Sn}$ ,  $^{195}\text{Pt}$ ,  $^{203}\text{Tl}$ ,  $^{207}\text{Pb}$   
Izotópgyakoriság, érzékenység,  $T_1$  relaxációs idő  
A legismertebb kémiai eltolódástartományok, példák

**KÉM/104** A fehérjekristallográfia módszerei

[Harmat Veronika – ROJKABT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, nem kötelező, nem ismételhető

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 fehérjekristallográfiában. Alkalmazások a gyógyszertervezésben. Membránfehérjék szerkezetvizsgálata. Időfelbontásos kristallográfia

**KÉM/105** Szilíciumorganikus kémia

[Szalay Roland – SZRKABT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, nem kötelező, nem ismételhető

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 vegyületcsoportok (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. sztereoszelektív szililezési eljárások. A Si-organikus vegyületek alkalmazása az anyagtudományokban. A szilicszeszkvioxánok jelentősége. Bevezetés a bioszilíciumorganikus kémiába. Si-tartalmú gyógyszerek.

**KÉM/106** Elméleti Szerves Kémia II.

[Hajós György – HAGMAAE.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, nem kötelező, nem ismételhető

**KÉM/107** Szerves és biomolekuláris kémia újabb eredményei

[Hajós György – HAGMAAE.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, nem kötelező, nem ismételhető

**KÉM/108** A biológiai fehérjeszintézis kémiája

[Gáspári Zoltán – GAZKACT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, nem kötelező, 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 transláció 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 transláció iniciációja I. Inicáció prokarióta rendszerekben 7.A transláció iniciációja II. Inicációs mechanizmusok eukariótákban 8.A kodonfelfismerés mechanizmusa, a pontos transláció biztosítása 9.A szelenocisztein és a pirrolizin beépülése 10.A polipeptidlánc elongációja, a peptidkötés kialakulása 11.A transzlókáció mechanizmusa, az ehhez szükséges fehérjefaktorok működése 12.A peptidszintézis terminációja, a polipeptidlánc hirtoldozásának mechanizmusa 13.A fehérjeszintézist gátló antibiotikumok hatásmechanizmusa 14.A születő polipeptidlánc feltekeredése (kotranszlacionális folding), valamint szignálszekvenciák hatására bekövetkező események transláció közben (pl. membránfehérjék szintézise)

#### **KÉM/109 Szerves makromolekulák hőbomlása**

[Blaszó Marianne – BLMLAAT.ELTE](#)

3 kredit, elmélet, nem kötelező, 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](#)

**EÖTVÖS LORÁND TUDOMÁNYEGYETEM - TERMÉSZETTUDOMÁNYI KAR**  
**KÉMIA DOKTORI ISKOLA KÉPZÉSI TERVE**

3 kredit, elmélet, nem kötelező, 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/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, nem kötelező, 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, nem kötelező, nem ismételhető

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

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 szereznie. 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 leckönyvben.

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