

Differenciált szakmai ismeretek tárgyai

Tantárgy neve: Az analitikai kémiai eredmények kiértékelésének módszerei

Kredit: 2

Tantárgyfelelős: Virág István

A tantárgyfelelős neve/tanszéke: Analitikai Kémia

Előtanulmányi feltételek: BSc. szintű ismeretek analitikai kémiából, matematikából

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Mérési eredmények hibája – hibaterjedés

Hibasámítás (szórás) – statisztika – hipotézisvizsgálat

Korreláció és regresszió-analízis, Görbeillesztés – paraméterbecslés - legkisebb négyzetek módszere

Közelítő számítások: differenciál- és integrálszámítás közelítő módszerei

Korszerű számítástechnikai módszerek alkalmazása az analitikai kémiai eredmények kiértékelésében

Kötelező irodalom:

Ajánlott irodalom:

Veress Gábor, Pungor Ernő: Az analitikai kémiai adatfeldolgozás főbb módszerei, Tankönyvkiadó, Budapest, 1982

Szalma József: Mérési eredmények kiértékelésének alapjai, Tankönyvkiadó, Budapest, 1984

Tantárgy neve: Anyagszerkezet-vizsgálati laboratóriumi gyakorlat

Kredit: 6

Tantárgyfelelős: Sinkó Katalin

A tantárgyfelelős tanszéke: Analitikai Kémia Tanszék

Előtanulmányi feltételek: Műszeres analitikai kémia, fizikai kémia

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

FT IR – RAMAN spektroszkópia; Mössbauer spektroszkópia, Pozitron annihiláció; MAS NMR spektroszkópia; Elektrokémiai korrózió; Vékonyréteg-leválasztás; Elektronmikroszkópia; AFM ;Neutrodiffrakció és –szórás; Röntgenszórás; Ellipszometria

Kötelező irodalom*:

P. Lindner, Th. Zemb (eds): Neutron, X-Ray and Light Scattering, North-Holland, Oxford, 1991.

Bertóti I., Marosi Gy., Tóth A.(szerk): Műszaki felülettudomány és orvosbiológiai alkalmazásai

B+V, Budapest, 2003.

Ajánlott irodalom:

Tantárgy neve: Az anyagtudomány új kémiai módszerei A

Kredit: 2

tantárgyfelelős neve/tanszéke: Sinkó Katalin

Analitikai Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: szerves kémia, kolloidkémia

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Prekursorok előállítása: szerves, szerves, illetve fémorganikus kiindulási anyagok (speciális gázok; nagy tisztaságú, ill. speciális összetételű fémek, ötvözetek; kovalens és ionos hidridek; fém-halogenidok, -oxidok, -szulfidok; fém-alkoxidok, -karboxilátok, -diketonátok; fém-amidok, -imidek, -szilazidok; fémkomplexek, ill. komplex metallátok; kerámia-prekursorok); **Amorf rendszerek új előállítási módszerei, szol-gél technika** (szol-gél módszer kémiai folyamatai: hidrolízis, kondenzáció, gélrendszerek szárítása, hőkezelése, szol-gél módszer előnyei, hátrányai, alkalmazási lehetőségei porok, filmek, szálak, valamint tömbök gyártásában); **Polimer gélek, kémiai és szerkezetmódosító módszerek** (polimerek alapvető kémiai és fizikai tulajdonságai, polimer gélek, jól definiált makromolekuláris szerkezetek és előállítási módszereik, funkciós polimerek, alkalmazási lehetőségeik, polimer alapú nanoszerkezetek, nanotemplátok, nanohibridek); **Nemkonvencionális anyagok és tulajdonságaik** (orvosi, orvos-biológiai és robottechnikai alkalmazások mesterséges anyagai (műizmok és más mesterséges szervek, szabályozott hatóanyag célba juttatás hordozói), elektrostriktív, magnetrostriktív és piezoelektromos anyagok, elektroeológiai, magnetoreológiai és mágneses folyadékok, emlékező fémek és műanyagok)

Kötelező irodalom:

Brinker, C. J.; Scherer, G. W. *Sol-gel Science*; Academic Press: Boston, 1990.

R. W. Cahn: The coming of materials science, Pergamon, Amsterdam,

W. D. Callister: Materials Science and Engineering, An Introduction, Wiley,

W.F. Smith: Principles of Materials Science and Engineering, McGraw-Hill Publ.

Ajánlott irodalom:

J. Frommer, R.M. Overney, Interfacial Properties on the Submicrometer Scale, Am. Chem. Soc., Washington, 2000.

C.N.R. Rao, A. Müller, A.K. Cheetham, The Chemistry of Nanomaterials, Wiley-VCH Verlag, Weinheim, 2004.

Tantárgy neve: Bevezetés a nukleáris környezetvédelembe

Kredit: 2

Tantárgyfelelős: Homonnay Zoltán egyetemi tanár

A tantárgyfelelős tanszéke: Analitikai Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: a vegyész MSc. belépési követelményei, alapvető fizikai és kémiai ismeretek

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

A radioaktív sugárzás és az anyag kölcsönhatása. Dózisfogalmak a dózismérés elve, dózismérők típusai. A radioaktív sugárzás biológiai hatásai A sugárvédelem alapelvei. Külső és belső dózisterhelés meghatározása. A természetes és mesterséges eredetű dózisterhelés forrásai. A nukleáris fűtőanyagciklus és az atomreaktorok működése. A reaktorok dinamikus viselkedése és a szabályozás kritikus pontjai, balesetek. A fűtőanyagciklus hulladékainak csoportosítása és kezelése (temetés, tárolás). A nukleáris energiatermelés biztonsága növelésének és a hulladékelhelyezés megoldásának lehetséges jövőbeli módszerei. A nukleáris környezetellenőrzés módszerei és gyakorlata.

Kötelező irodalom:

Kiss István, Vértes Attila: Magkémia I., *Tankönyvkiadó*, Budapest, 1975

Ajánlott irodalom:

Kanyár B., Béres Cs., Somlai J., Szabó S.: Radioökológia és környezeti sugárvédelem (Tankönyv, 257 old.). Veszprémi Egyetemi Kiadó, Veszprém, 2000.

Tantárgy neve: Dúsításos módszerek az atomspektrometriában

Kredit: 2

Tantárgyfelelős: Zihné Perényi Katalin

Atantárgyfelelős tanszéke: Analitikai Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: a vegyész MSc. belépési követelményei

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Szennyeződés okai és csökkentésének módjai, laboratóriumi tisztaság. Áramló rendszerű analízis. *Hidridképzés:* hidridek fejlesztése, pH, oxidációs állapot és mátrix hatása, fázisválasztás, kifagyasztás, 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, beépítés FIA rendszerbe. *Kapcsolt technikák:* speciáció fontossága, elválasztástechnikák és atomspektrometriák kombinálása, interface (összekötőelem) megoldások. *Field flow fractionation:* elválasztástechnika és dúsítás, elve, típusai, alkalmazási területek.

Kötelező irodalom:

Ajánlott irodalom:

Tantárgy neve: Élelmiszeranalitika

Kredit: 2

tantárgyfelelős neve/tanszéke: Mihucz Viktor/ Analitikai Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: a vegyész MSc. belépési követelményei

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Az élelmiszerek mintavételi, minta-előkészítési, nedvesség- és energiatartalom meghatározási módszerei. A fő élelmiszer-összetevők – a zsír, fehérje, szénhidrát – valamint a kisebb koncentrációban jelenlévő komponensek - vitaminok, nehézfém-szennyezők és speciális élelmiszer-komponensek - meghatározására alkalmazott módszerek, az élelmiszerek komplex vizsgálata. A vizsgálati eredmények minőségbiztosítására, a laborakkreditálásra vonatkozó tudnivalók.

Kötelező irodalom*: *Compulsory: Dr. László Györgyné, Novákné dr. Fodor Marietta: Élelmiszeranalitika, 1999, Agrárszakoktatási intézet*

Ajánlott irodalom: szabványok

Tantárgy neve: Fémek és ötvözetek szerkezete és tulajdonságai

Kredit: 4

Tantárgyfelelős: Kuzmann Ernő

A tantárgyfelelős tanszéke: Analitikai Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: A fizika és termodinamika alapjainak alaptárgyi szintű ismerete.

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Válogatott fejezetek a fémfizika és fémtan témaköréből. Fémek elektronmodelljei. Kristályszerkezetek. Atomsugarak. Fémes elemek kristályrácsai. Kristályhibák. Ötvözetek. Elsődleges szilárd oldatok. Fémközi vegyületek. Fázisdiagramok. Fázisátalakulások. Amorf ötvözetek. Fémek és ötvözetek elektromos tulajdonságai. Szupravezetés. Fémek és ötvözetek mágneses tulajdonságai.

Kötelező irodalom:

Egységes tankönyv vagy jegyzet nincs.

Ajánlott irodalom:

C.S. Barrett, T.B. Massalski, Structure of Metals, *MacGraw Hill*, London, 1966

J. Verő, M. Káldor, Fémtan, Nemzeti Kiadó, Bp, 1977.

Ch. Kittel, Bevezetés a szilárdtestfizikába, Műszaki Kiadó, Bp, 1981.

A.G.Guy, Fémfizika. Műszaki Kiadó. Bp. 1978.

Tantárgy neve: Fémkomplexek oldatreakciói. Kinetika és mechanizmus

Kredit: 2

Tantárgyfelelős: Simándi László, egyetemi magántanár

A tantárgyfelelős tanszéke: Analitikai Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: a vegyész MSc. belépési követelményei, alapvető szervetlenkémiai és és fizikokémiai ismeretek

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

A koordinációs kémia alapfogalmai. A fémkomplexek reakciói oldatban: komplexképződési és ligandumcsere reakciók. A ligandumszubsztitúció mechanizmusa: disszociatív, asszociatív és kicserélődési (exchange) mechanizmus. A fémkomplexek redoxireakciói. Külső és belső szférás elektronátvitel, atomátvitel. Lineáris szabadenergia összefüggések: kinetika és termodinamika.

Kötelező irodalom:

Simándi László: Fémkomplexek oldatreakció. Kinetika és mechanizmus (jegyzet), előadó adja

Ajánlott irodalom: Szemelvények a szakirodalomból (előadó adja)

Tantárgy neve: Gázkromatográfia és folyadékkromatográfia

Kredit: 2

Tantárgyfelelős neve: Perl Miklósné

A tantárgyfelelős tanszéke: Analitikai Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: Az Msc belépési követelményei

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

A kromatográfia története, a GC és a HPLC összehasonlítása: feltételek, lehetőségek és eredmények, hidroxil-csoportot tartalmazó szerves vegyületek analízise, karboxil-csoportot tartalmazó szerves vegyületek analízise, aminosavak analízise, cukrok, alkoholok, savak és flavonoidok szimultán kimutatása

Kötelező irodalom:

Ajánlott irodalom:

Tantárgy neve: Gyógyszeranalitika

Kredit: 2

Tantárgyfelelős: Görög Sándor

A tantárgyfelelős tanszéke: Analitikai Kémiai Tanszék (Richter Gedeon Rt.)

Előtanulmányi feltételek: MSc-hallgatóktól elvárható klasszikus analitikai, kromatográfiás és spektroszkópiai ismeretek

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Gyógyszeranalitika, hangsúllyal az ipari vonatkozásokra.

A gyógyszeranalitika helye a korszerű gyógyszerkutatásban és gyártásban.

A gyógyszeranalitika gyakorlatának szervezete (ipari és hatósági minőség-ellenőrzés, gyógyszerkönyvek.

Gyógyszer-alapanyagok vizsgálata különös tekintettel a szennyezésprofilra), kisserelt gyógyszer-készítmények vizsgálata, gyógyszerek és metabolitjaik biológiai mintákban.

Válogatott fejezetek: enantiomer-analízis, kapiláris elektroforézis és rokon módszerek.

Kötelező irodalom: -

Ajánlott irodalom:

Számos, a hallgatóknak lesokszorosítva átadott különlenyomat.

Tantárgy neve: Homogén katalízis

Kredit: 2

Tantárgyfelelős: Simándi László, egyetemi magántanár

A tantárgyfelelős neve/tanszéke: Analitikai Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: a vegyész MSc. belépési követelményei, alapvető szervetlenkémiai és fémorganikus kémiai ismeretek

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Fémorganikus reakciók típusai, homogén katalitikus reakciók mechanizmusa: olefinek hidrogénezése, oligomerizációja, addíciós reakciói és oxidációja, szénhidrogének oxidációja, a szén-monoxid reakciói: hidroformilezés, karbonilezés, izomerizáció. Enantioszelektív hidrogénezés és oxidáció.

Kötelező irodalom:

Simándi László: Homogén katalízis (jegyzet),

Ajánlott irodalom: Szemelvények a szakirodalomból (előadó adja)

Tantárgy neve: Időben és térben periodikus kémiai reakciók

Kredit: 2

Tantárgyfelelős: Orbán Miklós

A tantárgyfelelős tanszéke: Analitikai Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: BSc. szintű szerves kémiai, szerves kémiai és fizikai kémiai (elsősorban reakciókinetikai) ismeretek

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Időben és térben periodikus kémiai rendszerek (oszcilláló kémiai reakciók és periodikus mintázatképződés) kialakulási feltételeinek tárgyalása, az oszcillációs ciklusok magyarázata, az oszcilláló reakciók csoportjainak és fontosabb képviselőinek ismertetése, periodikus kémiai rendszerek tervezése

Kötelező irodalom:

Ajánlott irodalom:

Nemlineáris Dinamika és Egzotikus Kinetikai Jelenségek Kémiai Rendszerekben (egyetemi jegyzet), Dr. Bazsa György (szerkesztő), 1992

R.J. Field, M. Burger (Eds): Oscillations and Traveling Waves in Chemical Systems, John Wiley, 1985, ISBN 0-471 89834-6

I.R. Epstein, J. Pojman: An Introduction to Nonlinear Chemical Dynamics, Oxford Univ, Press, 1998, ISBN 0-19-509670-3

Tantárgy neve: ISO 9000: Minőségbiztosítás és analitikai kémia

Kredit: 2

Tantárgyfelelős: Varga Imre Péter

A tantárgyfelelős tanszéke: Analitikai Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: BSc. szintű analitikai kémiai ismeretek

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

A minőségbiztosítási rendszerek történeti áttekintése. A különböző minőségbiztosítási rendszerek összehasonlítása az ISO 9000 rendszerrel. Szabványelemek kritikai tárgyalása. Különleges kritériumok az analitikai laboratóriumi munka gyakorlatában. Akkreditációs eljárás ismertetése. Analitikai mérések validálása, mintavételi és kiértékelési módszerek tárgyalása.

Kötelező irodalom*:

Sokszorosított magyar és angol nyelvű irodalom

Ajánlott irodalom:

Tantárgy neve: Kapcsolt mérés technikák környezeti minták speciációs vizsgálatára

Kredit: 2

Tantárgyfelelős: Mihucz Viktor Gábor, tudományos munkatárs

A tantárgyfelelős tanszéke: Analitikai Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: vegyész MSc belépési követelményei

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

A speciációs analízisben alkalmazott közvetlen (HPLC-ICP-AES, HPLC-ICP-MS, HPLC-FAAS, GC-AAS, LC-HG-QF-AAS), illetve közvetett (HPLC-GF-AAS, HPLC-TXRF, TLC, OPLC-TXRF, TLC-LA-ICP-MS) kapcsolt mérés technikák általános jellemzése; az As, Cr, Hg, Ni, Pb, és Sn kémiai formájának meghatározása különféle kapcsolt mérés technikákkal.

Kötelező irodalom:

Az elemanalitika korszerű módszerei (Szerk.: Záray Gyula), Akadémiai Kiadó, 2006
Handbook of Elemental Speciation (Eds.: R. Kertulis, H. Crews, J. Caruso, K.G. Heumann), Wiley, 2005

Ajánlott irodalom:

Modern Methods for Trace Element Determination (Eds.: C. Vandecasteele, C.B. Block), Wiley, 1995
Practical HPLC method development (Eds.: L.R. Snyder, J.J. Kirkland, Glajch J.L.), Wiley, 1997
Atomic Absorption and Plasma Spectrometry (Ed.: J. R. Dean), Wiley, 1997

A hallgatók az előadás anyagát a félév elején Reader Acrobat fájlformátumban elektronikusan is megkapák.

Tantárgy neve: Kísérleti módszerek az anyagtudományban

Kredit: 6

tantárgyfelelős neve/tanszéke: Homonnay Zoltán egyetemi tanár

Analitikai Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: a vegyész MSc. belépési követelményei

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

A laboratóriumi gyakorlat célja a félév felében áttekintést adni az anyagtudományban használatos modern kémiai preparatív technikákról és anyagvizsgálati, karakterizálási módszerekről, illetve a félév második felében egy, a hallgató által kiválasztott technika esetén elmélyültebb ismereteket közvetíteni. A preparációs technikák magukban foglalnak szilárdtest-kémiai, kolloidkémiai, elektrokémiai stb. módszereket, a vizsgálati módszerek pedig az elemanalízistől az elválasztástechnikákkal kombinált tömegspektrometriás módszereken keresztül az optikai, a röntgen és a nukleáris szerkezetvizsgálatokig terjednek.

Kötelező irodalom:

Egyedi mérés- és módszerleírások.

Ajánlott irodalom:

Az adott laborgyakorlat oktatója által ajánlott könyvek, cikkek.

Tantárgy neve: Környezetanalitika

Kredit: 2

Tantárgyfelelős: Záray Gyula

A tantárgyfelelős tanszéke: Analitikai Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: környezetkémia, műszeres analitika

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

A levegő gáz és szilárd halmazállapotú szennyezőinek meghatározására alkalmas laboratóriumi és in-situ mérés technikák bemutatása a mintavételtől a kiértékelésig bezárólag. Szenny- felszíni és ivóvizek szennyezőinek csoportosítása és detektálásukra kidolgozott műszeres analitikai eljárások. A vízminőség passzív és aktív monitorálása, kémiai és biológiai módszerek

Kötelező irodalom:

Dinya-Suszter-Kiss-Papp-Bak: Környezetszennyező szerves vegyületek analitikája, Debreceni Egyetem, Jegyzet, 2002.

Mészáros Ernő, Levegőkémia, Veszprémi Egyetemi Kiadó, 1997.

Ajánlott irodalom:

Cornelis-Caruso-Heumann: Handbook of Elemental Speciation II. Wiley, 2005.

Manahau S.E.: Environmental Chemistry, Lewis Publisher, 1994.

Tantárgy neve: Környezeti problémák komplex kezelése

kvvn9473/1

Kredit: 2

tantárgyfelelős neve/tanszéke: Dr. Orsovai Imre ügyvezető igazgató,

Geoökoterv Környezetföldtani Kutató és Tervező Kft

Analitikai Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: négy félév természettudományos tanulmányok

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Alapozás: a földtani közeg alkotó elemeinek felületfizikai tulajdonságai, a fluidumok tározódása és mozgása a földtani közegben

Alkalmazás: környezeti hatástanulmány, környezeti tényfeltárás, környezeti kockázatelemzés, különös tekintettel a felszín alatti régióra

Kötelező irodalom:

Humánökológia (2005) Medicina Kiadó, 6. fejezet

Ajánlott irodalom:

Orsovai, I. (1994): Fejezetek a környezetföldtan tárgyköréből in: Humánökológia posztgraduális jegyzetsorozat

Tantárgy neve: A környezet károsodása és védelme

KV6KR2

Kredit: 2

tantárgyfelelős neve/tanszéke: Barkács Katalin adjunktus, Analitikai Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: a vegyész MSc. alapkövetelményei, alapvető kémiai ismeretek (kémia BSc. , vagy a kémiai technológia (KA6TC3), környezetkémia (KV6KR1) tárgyak anyaga ill. ezekkel ekvivalens ismeretek)

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

A környezet, környezeti elemek, környezetszennyezés, környezeti kár, környezetvédelem alapfogalmai, a környezetkárosodás okai. Természetes és antropogén hatások, a védekezés szükségessége. Gazdasági, jogi, műszaki eszközök a szennyezések megelőzésére és a környezet védelmére. Napjaink főbb környezeti problémái, a környezetvédelem hazai és nemzetközi vonatkozásai. A környezetvédelmi-, a kémiai biztonságról és a hulladékgazdálkodásról szóló törvények, rendeletek, szabványok idevonatkozó részei.

Témakörök: levegőtisztaság védelem (energiatermelés, közlekedés), a szilárd halmazállapotú szennyezők (háztartási, mezőgazdasági, ipari) és a hulladékok káros hatása elleni védelem, víz- és talajminőség védelem (szilárd, iszapszerű és folyékony hulladékok, szennyezőanyag áramok); a zaj - és rezgésvédelem. Szennyező források, szennyezőanyag csoportok, a szennyezők egészségügyi és környezeti hatásai, kvalitatív és kvantitatív meghatározásuk, szabályozásuk, a szennyezés-csökkentés technológiai lehetőségei és technikai eszközei - témakörrészek szerint a környezeti „elemek” hasonló ill. eltérő vonásainak áttekintő értékelése a környezeti problémák komplex igényű kezelését célzó szemlélet kialakítása érdekében.

Kötelező irodalom:

Ajánlott irodalom:

Dr. Barótfi István: Környezettechnika kézikönyv, Radó nyomda, Eger, 1991

Dr. Árvai József: Hulladék-gazdálkodási kézikönyv, Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1991

Ulrich Förstner: Környezetvédelmi technika, Springer Hungarica Kiadó Kft., Budapest, 1993

Dr. Ligetvári Ferenc : Környezetünk és védelme 1.,3. kötetek, Ökológiai Intézet a

Fenntartható Fejlődésért Alapítvány, Miskolc, 1999 és 2000.

Internet web oldalak: www.kemtech.net, www.kvvm.hu

Tantárgy neve: Környeztkémiai és környezetanalitikai labor

Kredit: 8

Tantárgyfelelős: Orgoványi Judit, tanársegéd

A tantárgyfelelős tanszéke: Szerves Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: a vegyész MSc. belépési követelményei, alapvető műszeres analitikai és kémiai technológiai ismeretek

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Benzinüzemű gépjárművek szénhidrogén kibocsátásának vizsgálata nagyhatékonyságú gázkromatográfiával; nikkelvegyületek meghatározása erőműi pernyében; az elektrokinetikai potenciál meghatározása mikroelektroforézissel; eleveniszapos szennyvíztisztítás laboratóriumi vizsgálata; vízszennyezők meghatározása gázkromatográfiával; nagyhatékonyságú folyadékkromatográfia környeztkémiai analitikai alkalmazásai; induktív csatolású plazma atomemissziós spektrometria környeztkémiai analitikai alkalmazásai; dinamikus nedvesedési vizsgálatok; korróziósebesség meghatározása polarizációs ellenállás mérésével; fémek anódos passzíválásának vizsgálata ciklikus voltammetriával.

Kötelező irodalom:

Dr. Varga Enikő, Garay Ferenc: Környeztkémiai analitika – környezettechnológia praktikum, ELTE Eötvös Kiadó, Budapest
Mérésleírások

Ajánlott irodalom:

Tantárgy neve: Kozmokémia

Kredit: 2

Tantárgyfelelős: Lévay Béla egyetemi tanár

A tantárgyfelelős tanszéke: Analitikai Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: Nincsenek. A téma megértéséhez szükséges magfizikai, ill. magkémiai alapokat az előadás során kapják meg a hallgatók.

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Vegyészek és tanárjelöltek számára ajánlott kurzus. Azokra a kérdésekre keres választ, hogy mikor, hol és hogyan keletkeztek a kémiai elemek, miért éppen ilyen az előfordulási gyakoriságuk. A problémakör szorosan kapcsolódik a nukleáris asztrofizika tágabb tématerületéhez, és csak azzal együtt tárgyalható. Így sorra kerülnek az Univerzum keletkezésével és a csillagok fejlődésével kapcsolatos mai modern elképzelések, valamint ezeknek a magfizikával való kapcsolata is.

Kötelező irodalom: A tanórán vetített fóliák másolatban kiadott anyaga.

Ajánlott irodalom: Vértes Attila: Magkémia I. Tankönyvkiadó, Budapest, egyetemi jegyzet;
Kiss István-Vértes Attila: Magkémia, Akadémiai Kiadó, Budapest

Tantárgy neve:	Levegőkémia
-----------------------	-------------

Kredit:

Tantárgyfelelős: Salma Imre

A tantárgyfelelős tanszéke: Analitikai Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: környezetkémia előadás

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

1. a légkör és összetevőinek szerepe a globális éghajlat kialakulásában és változásában
2. a légköri aeroszol típusai, keletkezési folyamatai és dinamikája
3. az aeroszokok termodinamikája
4. az aeroszol részecskék kémiai jellemzése
5. levegőkörnyezeti toxikológia
6. a légköri aeroszol környezeti és egészségügyi hatásai
7. aeroszol mérés-technika: aerodinamikai, elektrodinamikai és optikai módszerek

Kötelező irodalom:

Mészáros, E., 1997. Levegőkémia, Veszprémi Egyetemi Kiadó

Papp, S., 2002. Biogeokémia, Veszprémi Egyetemi Kiadó

Ajánlott irodalom:

Wayne, R.P., 2000. Chemistry of atmospheres, 3rd ed., Oxford University Press

Warneck, P., 1999. Chemistry of the natural atmosphere, 2nd ed., Elsevier

Seinfeld, J.H., Pandis, S.N., 1998. Atmospheric Chemistry and Physics, Wiley

Finlayson-Pitts, B.J., Pitts, J.N., 1990. Atmospheric Chemistry: Fundamentals and Experimental Techniques, Wiley

Holton, J.R., Curry, J.A., Pyle, J.A. (eds.), 2003. Encyclopedia of Atmospheric Sciences, Vols. 16, Academic Press

Tantárgy neve: Mikroanalitikai mérés-technikák

Kredit: 2

Tantárgyfelelős: Varga Imre Péter

A tantárgyfelelős tanszéke: Analitikai Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: BSc. szintű analitikai kémiai és műszeres analitikai ismeretek

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Atomszínképek keletkezése és sajátosságai. Nagyhőmérsékletű folyamatok spektroszkópiai forrásokban. A röntgensugárzás előállítására szolgáló módszerek, folytonos és vonalas sugárforrások tárgyalása. Hullámhossz- és energiadiszperzív spektrométerek működése. Az ICP-AES, ICP-MS, AAS és TXRF módszer analitikai teljesítőképessége, kvalitatív és kvantitatív analízis. Alkalmazási példák az ipar, a környezeti kémia és az élelmiszervizsgálatok területéről.

Kötelező irodalom*:

R. Klockenkamper: TXRF analysis, Wiley-New York, 1997

Záray Gy.(szerk.): Az elemanalitika korszerű módszerei, Akadémiai-Budapest, 2006

Ajánlott irodalom:

Tantárgy neve: Mintavételi és minta-előkészítési módszerek az analitikai kémiában

Kredit: 2

Tantárgyfelelős: Tatár Enikő

A tantárgyfelelős tanszéke: Analitikai Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: a vegyész MSc. belépési követelményei

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

A minták típusai; mintavétel gáz-, folyadék- és szilárd halmazállapotú anyagokból, fémekből. Mintavétel speciációs elemzésekhez és környezeti minták analíziséhez (levegő, vizek, biológiai minták, üledékek és talajok); A minta-előkészítés hibaforrásai; Klasszikus minta-előkészítési módszerek (oldás, feltárás, savas ömlesztéses feltárás, szerves anyagok roncsolása); Modern feltárási módszerek (nagyhőmérsékletű feltárás hagyományos hőközléssel; mikrohullámú sugárzással támogatott feltárási módszerek; szerves eredetű (biológiai) minták hamvasztása); A minták oldásához, feltáráshoz alkalmazott reagensek. Dúsítási és elválasztási módszerek; Minta-előkészítési eljárások elem-speciációs vizsgálatokhoz

Kötelező irodalom:

Záray Gy.: Az elemanalitika korszerű módszerei Akadémia Kiadó 2006

Ajánlott irodalom:

R. Bock A Handbook of Decomposition Methods in Analytical Chemistry, Marr, I. L., 1st ed.; John Wiley and Sons: New York, 1979

H.M. Kingston, L.B. Jassie: Introduction to microwave Sample Preparation, ACS, Washington, DC, 1988

C. Vandecasteele and C.B. Block: Modern methods for trace element determination, John Wiley & Sons, Chichester, 1993

R.M. Reeve: Environmental Analysis, John Wiley & Sons, Chichester, 1994

D.A. Skoog, D.M. West, F.J. Holler: Analytical chemistry, Saunders College Publishing, Fort Worth, 1992

Tantárgy neve: Mintázatok kialakulása kémiai és biológiai rendszerekben

Kredit: 2

Tantárgyfelelős: Szalai István

A tantárgyfelelős tanszéke: Analitikai Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: Matematikai és fizikai alapismeretek. (Kémiai BSC esetén: Bevezető matematika kémikusoknak, Fizika I.; másoknak: ezzel ekvivalens ismeretek)

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Nemlineáris kémiai és biológiai rendszerekben megfigyelhető mintázatképződés elvi alapjai. Nemlineáris folyamatok termodinamikai leírása. Instabilitások nemegyensúlyi rendszerekben. Stabilitásvizsgálat. Kinetikai és diffúzió vezérelt instabilitások reakció-diffúzió rendszerekben. Aktivátor-inhibitor modell. Káosz kémiai és biológiai rendszerekben.

Kötelező irodalom*:

Pontrjagin: Közönséges differenciálegyenletek (Akadémiai Kiadó, 1972)

Tél-Gruiz: Kaotikus Dinamika (Nemzeti Tankönyvkiadó, 2002)

Nemlineáris dinamika és egzotikus kinetikai jelenségek kémiai rendszerekben (egyetemi jegyzet, Szerkesztő: Dr. Bazsa György, Debrecen-Budapest-Gödöllő, 1992)

Ajánlott irodalom:

Murray: Mathematical Biology (Springer, 2002)

Camazine, Deneubourg, Franks, Sneyd, Theraulaz, Bonabeau: Self-Organization on Biological Systems (Princeton University Press, 2003)

Tantárgy neve: Modern elektroanalitikai módszerek

Kredit: 2

Tantárgyfelelős: Dr. Inzelt György egyetemi tanár

A tantárgyfelelős tanszéke: Fizikai Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: a vegyész MSc. belépési követelményei, alapvető analitikai és elektrokémiai ismeretek

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Ionszelektív elektródok, potenciometria, pH mérés. Voltammetriás technikák: ciklikus voltammetria, impulzus voltammetria, négyszög hullám voltammetriák. Váltóáramú módszerek. Szilárd anyagok analízise. Spektroelektrokémiai technikák. Mikroelektródok. Elektrokémiai nanogravimetria.

Kötelező irodalom:

Inzelt Gy.: Az elektrokémia korszerű elmélete és módszerei I-II, Nemzeti Tankönyvkiadó, Budapest, 1999;

Farsang Gy.: Kiegészítő fejezetek az elektroanalitika tárgyköréhez, jegyzet, Tankönyvkiadó, Budapest, 1984;

Kékedy L., Kékedy Nagy L.: Műszeres analitikai kémia I-III, Az Erdélyi Múzeum-Egyesület, Kolozsvár, 1995,1998,2003.

Ajánlott irodalom:

Electroanalytical Methods, F.Scholz (ed), Springer, Berlin, Heidelberg, 2002; A.J.Bard, L.R.Faulkner: Electrochemical Methods, Wiley, 2001; Electroanalytical Chemistry. A series of Advances, Vols 1-22, Marcel Dekker, 1966-; G.Harsányi: Polymer Films in Sensor Applications, Technomic, Lancaster, Basel, 1995; C.M.A. Brett, A.M.Oliveira-Brett: Electrochemistry, Principles, Methods and Applications, Oxford Univ.Press, Oxford, 1993; Microelectrodes (eds.: M.I.Montenegro, M.A. Queirós, J.L.Daschbach), Kluwer, 1990.

Tantárgy neve: Modern nagyműszeres analitikai módszerek

Kredit: 8

Tantárgyfelelős: Tatár Enikő

A tantárgyfelelős tanszéke: Analitikai Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: Bsc. szintű analitikai ismeretek

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Transzmissziós elektronmikroszkópos analízis, gázkromatográfia-tömegspektrometria, ionkromatográfia, elektroforézis, ultramikroelektrodok alkalmazása, pásztázó elektronmikroszkópia és elektronsugaras mikroanalízis

Kötelező irodalom:

egyedi mérésleírások

Ajánlott irodalom:

Tantárgy neve: Molekuláris felismerés és szupramolekuláris kémia

Kredit: 2

Tantárgyfelelős: Barczáné Buvári Ágnes egyetemi docens

A tantárgyfelelős tanszéke: Analitikai Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: alapvető szervetlen és szerves kémiai ismeretek

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

A szupramolekuláris kémia az utolsó évtizedekben a kémia igen dinamikusan fejlődő ága, melyet gyakran “zárványkomplex-képződésnek”, “host-guest” kémiának is említene. Az előadás *nem* konkrét analitikai módszerrel, hanem az elvi háttérrel kívánna foglalkozni.

Szupermolekulák szerveződése és funkciói. Néhány példa az összetartó erőkre. Molekuláris felismerés, mint a szupramolekuláris rendszer működésének alapja. Gazdamolekula-típusok.

Koronaéterek, szferandok és rokonaik. Kalixarének, karcerandok. Természetes (és királis)

zárványkomplex-képzők: a ciklodextrinek. Természetes és mesterséges receptorok - a

receptorok tervezésének elvi alapjai és gyakorlati kivitelezése. A tervezett kölcsönhatás

erősségének ellenőrzése és jellemzése, a befolyásoló tényezők felderítése. A

szupramolekuláris kémia (pl. ciklodextrinek alkalmazásának) analitikai kémiai vonatkozásai.

Kötelező irodalom:

J.-M. Lehn: Supramolecular chemistry: from complexes to complexity, Angew. Chem. Int. Ed. Engl., **67** (1988) 89

Ajánlott irodalom:

D. J. Cram - J. M. Cram: Container molecules and their guests, The Royal Society of Chemistry, 1994

G. Gokel: Crown ethers and cryptands, The Royal Society of Chemistry, 1991

Tantárgy neve: A Mössbauer-spektroszkópia alapjai és alkalmazásai

Kredit: 4

Tantárgyfelelős: Kuzmann Ernő

A tantárgyfelelős tanszéke: Analitikai Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: A magkémia vagy magfizika alapjainak alaptárgyi szintű ismerete

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

A Mössbauer spektroszkópia által mérhető alapvető hiperfinom kölcsönhatások. A Mössbauer- spektrumok jellemzői. A Mössbauer-spektroszkópia méréstechnikái. Spektrumértékelések. Alkalmazások. Kvalitatív és kvantitatív analitikai alkalmazások. Kémiai alkalmazások. Biokémiai alkalmazások. Magfizikai alkalmazások. Szilárdtestfizikai alkalmazások. Ipari alkalmazások. Egyéb alkalmazások.

Kötelező irodalom:

Egységes tankönyv vagy jegyzet nincs.

Ajánlott irodalom:

N.N. Greenwood, T. C. Gibb, Mössbauer Spectroscopy, *Chapman and Hall*, London ,1971
U. Gonser (Ed): Mössbauer Spectroscopy, Topics in Applied Physics, *Springer*, Berlin, 1975.
A. Vértes, L. Korecz, K. Burger: Mössbauer Spectroscopy, *Elsevier*, Amsterdam, 1979.
E. Kuzmann, Z. Homonnay, S. Nagy, K. Nomura: Mössbauer spectroscopy, in
Handbook of Nuclear Chemistry (Eds. Vértes A., Nagy, S., Klencsár, Z.) Kluver, Vol. 3.

Tantárgy neve: Nagyérzékenységű nukleáris analitikai módszerek

Kredit: 2
tantárgyfelelős neve/tanszéke: Salma Imre, Analitikai Kémiai Tsz.
Előtanulmányi feltételek: magkémiai vagy magfizikai előadás

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

A nukleáris analitika helye az analitikai módszerek között, sajátosságok, előnyök és korlátok
 Neutronaktivációs analízis (NAA)
 8. az NAA elve és lépései
 9. az aktiválás időtörvényei, összetett nukleáris átalakulások kinetikája, Bateman-Rubinson egyenlet
 10. aktivációs neutronforrások, működési elvük és jellemzésük
 11. a γ -sugárzás mérése és értékelése: spektrométerek jellemzői, működési elvük és kalibrálásuk, mérési statisztika
 12. az NAA módszerei: abszolút, relatív, komparátoros és paraméteres standardizálás, interferenciák
 13. az NAA változatai: instrumentális, radiokémiai NAA, szubsztöchiometriai elv, prompt- γ NAA
 14. az NAA analitikai jellemzése: az analízis kritériumai, Currie-szintek
 15. környezetkémiai alkalmazások és specifikus mintagyűjtési módszerek
 Proton-indukált röntgenemissziós analízis (PIXE)
 16. könnyű töltött részecskék kölcsönhatása az anyaggal
 17. az alkalmazott gyorsítók és jellemzésük
 18. energiadiszperzív röntgenspektrometria
 19. a PIXE módszerei: standardizálási eljárások különböző targetvastagság esetén
 20. mikro-PIXE: nyalábfókuszálás és térbeli felbontás
 21. a PIXE tipikus alkalmazási köre a környezetkémiaiában: aeroszolok, biológiai eredetű anyagok, régészeti

Kötelező irodalom*:

Salma, I., Műszeres neutronaktivációs analízis. In: Az elemanalitika korszerű módszerei, szerk. Záray, Gy., 417–505. old., Akadémiai Kiadó, Budapest, 2006.

Ajánlott irodalom:

Ehmann, W.D. – Vance, D. E.: Radiochemistry and Nuclear Methods of Analysis. Willey, New York 1991.
 Erdtmann, G. – Petri, H.: Nuclear Activation Analysis: Fundamentals and Techniques. In: Treatise on Analytical Chemistry (Eds.: Elving, P. J. – Krivan, V. – Kolthoff, I. M.), Willey, New York 1986.
 Vértes, A. – Nagy, S. – Klencsár, Z. (Eds.): Handbook of Nuclear Chemistry. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht 2003.

Tantárgy neve: Nukleáris módszerek biológiai alkalmazásokkal

Kredit: 2

Tantárgyfelelős: Homonnay Zoltán egyetemi tanár

A tantárgyfelelős tanszéke: Analitikai Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: a vegyész MSc. belépési követelményei, alapvető fizikai és kémiai ismeretek.

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

A magkémia alapjainak áttekintése, a radioaktív sugárzás diagnosztikai és sugárhatás elven történő alkalmazásai. A biológiában használt technikák tematikus tárgyalása: izotóphígításos analízis, radioimmunoassay, nyomjelzéstechnika a növényélettani és állattani valamint emberi alkalmazásokban, izotóppal jelzett vegyületek előállítása és felhasználása, PET-diagnosztika, CT és más leképezési eljárások. Terápiás módszerek, nukleáris medicina, a sugárzás biológiai hatásai. Stabil izotópos analitikai eljárások alapjai, izotópeffektusok.

Kötelező irodalom:

Kiss István, Vértes Attila: Magkémia I., *Tankönyvkiadó*, Budapest, 1975

Ajánlott irodalom:

Handbook of Nuclear Chemistry, ed. A. Vértes, S. Nagy, Z. Klencsár, Kluwer Academic Publishers, 2003 releváns fejezetei

Tantárgy neve: Nukleáris szerkezetvizsgáló módszerek

Kredit: 2

Tantárgyfelelős neve: Vértes Attila

A tantárgyfelelős tanszéke: Analitikai Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: Matematika, fizika és kémia BSc szintű ismerete.

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

- Az előadás foglalkozik a Mössbauer-spektroszkópia (MS) magfizikai-, szilárdtest fizikai-, és atomfizikai alapjaival, valamint az MS transzmissziós és reflexiós 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 (μ SR) 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.

Kötelező irodalom*:

A. Vértes, I. Kiss: Nuclear Chemistry, Akadémiai Kiadó, Elsevier, 1987.

A. Vértes, L. Korecz, K. Burger: Mössbauer Spectroscopy, Akadémiai Kiadó, Elsevier, 1979.

Ajánlott irodalom:

A. Vértes, S. Nagy, Z. Klencsár (editors): Handbook of Nuclear Chemistry, Kluwer Academic Publishers, 2003.

Tantárgy neve: NUKLEÁRIS VIZSGÁLÓ MÓDSZEREK

Kredit: 3

Tantárgyfelelős: Kuzmann Ernő

A tantárgyfelelős tanszéke: Analitikai Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: A matematika, a fizika és a nukleáris tudományok alapjainak alaptárgyi szintű ismerete.

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Nukleáris módszerek kémiai analitikai célra. Röntgenfluoreszcencia radioaktív sugárforrásokkal. Magsugárzások abszorpcióján és szóródásán alapuló módszerek. Aktivációs analitika és alkalmazásai. Rutherford visszaszóráson alapuló analitika. Szerkezetvizsgáló módszerek. Mössbauer-spektroszkópia alapjai (hiperfinom kölcsönhatások, Mössbauer-paraméterek és a belőlük nyerhető információk), mérés technikája és alkalmazásai. Pozitronannihilációs spektroszkópia alapjai, Neutronspektroszkópia, neutrodiffrakció (neutronforrások, neutronspektroszkópiái alapok, Neutronok polarizálása, neutron spin echo, neutrodiffrakció) és néhány alkalmazása. Magmágneses rezonancia (az MMR által mért kölcsönhatások jellemzői, a relaxációs idő és mérési módszerei) és néhány fémfizikai alkalmazása. Erőművi reaktorok. Gyorsítók (Cocroft Walton gyorsító elektrosztatikus részecskegyorsítók, egyszerű ciklikus gyorsítók, önfázis fókuszáló gyorsítók). Ionimplantáció és alkalmazásai. Nyomjelzéstechnika és alkalmazása technológiai folyamatokban résztvevő anyagok azonosítására. Ipari mérés és szabályozástechnikai alkalmazások. Ipari radiográfia, defektoszkópia

Kötelező irodalom:

Egységes tankönyv vagy jegyzet nincs.

Ajánlott irodalom:

Kiss Dezső, Kajcsos Zsolt, Nukleáris Technika, Tankönyvkiadó, Budapest, 1984.

Tantárgy neve: NUKLEÁRIS VIZSGÁLÓ MÓDSZEREK LABORATÓRIUMI GYAKORLAT

Kredit: 2

Tantárgyfelelős: Kuzmann Ernő

A tantárgyfelelős tanszéke: Analitikai Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: A matematika, a fizika és a nukleáris tudományok alapjainak alaptárgyi szintű ismerete. Kapcsolódik az előadáshoz.

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Műszeres laboratóriumi gyakorlat, Izotópperjesztéses röntgenfluoreszcencia analízis. Mössbauer-spektroszkópia. Reaktortechnika. Mag mágneses rezonancia. Pozitron annihiláció spektroszkópia. Folyadékszcintilláció. Promt-gamma analízis. Neutronaktivációs analízis.

Kötelező irodalom:

Egységes tankönyv vagy jegyzet nincs. Mérésleírások.

Ajánlott irodalom:

Kiss Dezső, Kajcsos Zsolt, Nukleáris Technika, Tankönyvkiadó, Budapest, 1984.

Tantárgy neve: Oldategyensúlyi mérések, kiértékelésük és speciációs számítások

Kredit: 2

Tantárgyfelelős: Szakács Zoltán

A tantárgyfelelős tanszéke: Analitikai Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: a vegyész MSc. belépési követelményei, alapvető analitikai, fizikai-kémiai és számítógép-felhasználói ismeretek

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Protonálódási, fémion- és szupramolekuláris komplexképződési egyensúlyok vizsgálata potenciometriás, voltammetriás, elektroforetikus és spektrometriás (UV, CD, NMR) módszerekkel. Direkt és kompetíciós titrálások szimulációja, tervezése és kiértékelése interaktív formában (számítógépes tanteremben). Kötőhely-specifikus protonálódás és komplexképződés vizsgálata: mikrospeciáció, a kötőhelyek kooperativitása. Speciációs számítások több ligandum és fémion jelenlétében: kompetíció; óceánmodellek és biológiai folyamatok modelljei.

Kötelező irodalom:

-

Ajánlott irodalom:

Beck Mihály: *Komplex egyensúlyok kémiája*. Akadémiai Kiadó, Budapest, 1965.

Beck M. T., Nagypál I. *Chemistry of complex equilibria*.

Ellis Horwood Ltd., Chichester, 1990. (az előző kibővített kiadása angolul)

Gaizer Ferenc: *Elektronikus számítógépek alkalmazása komplex egyensúlyok számítására*.

A kémia újabb eredményei 49., Akadémiai Kiadó, Budapest, 1980.

Martell A. E., Moteatikis R. J. *The determination and use of stability constants*.

VCH, New York, 1988.

Meloun M., Havel J., Högföldt E. *Computation of solution equilibria*.

Ellis Horwood, Chichester, 1988.

Tantárgy neve: Plazmaspektroszkópia

Kredit: 2

Tantárgyfelelős: Záray Gyula

A tantárgyfelelős neve/tanszéke: Analitikai Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: környezetkémia, műszeres analitika

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Az egyen- és a váltóáramú ív, a szikra és glimmkisülések, valamint a MHz-GHz tartományban üzemelő nagyfrekvenciás plazmák mint analitikai sugár- és/vagy ionforrások általános jellemzése. A plazmába történő mintabevitelre alkalmas módszerek bemutatása. Az analitikai kémiában alkalmazást nyert plazma- és ionforrások teljesítőképességének (kimutatási határok, dinamikus tartomány, reprodukálhatóság, érzékenység stb.) összehasonlítása és néhány jellemző alkalmazási példa bemutatása.

Kötelező irodalom:

Az elemanalitika korszerű módszerei, Szerkesztette Záray Gyula, Akadémiai Kiadó, 2006.

Ajánlott irodalom:

Glow Discharge Plasmas in Analytical Spectroscopy, Edited by R.K.Marcus and J.A.C. Broekaert, Wiley, 2003.

Inductively Coupled Plasmas in Analytical Atomic Spectrometry, Edited by A. Montaser and D.W. Golightly, 1987.

Tantárgy neve: Scientific American – the international language of chemistry

Kredit: 2

Tantárgyfelelős: Nagy Sándor egyetemi docens

A tantárgyfelelős tanszéke: Analitikai Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: legalább alapszintű angol nyelvtudás

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

A hallgatók többször is felvehetik a kurzust 2-2 kredit értékben, ha a tanterv megengedi. Ugyanis a bevezető résztől eltekintve, mely szemeszterenként megismétlődik (elektronikus levelezés, önéletrajzírás stb.), a szemináriumok a hallgatók aktív részvételére építenek, változó konkrét tartalommal. A diákok rövid esszét írnak a kémia különböző témáiról, fordítási feladatokat oldanak meg angolra és vissza, valamint kiselőadásokat tartanak angolul.

Kötelező irodalom:

Nincs

Ajánlott irodalom:

John Daintith: A Dictionary of Chemistry, Oxford University Press, New York, 2004

Peter William Atkins and J.A. Beran: General Chemistry, Second Edition, Scientific American Books, N. Y., 1992

D.D. Ebbing, M.S. Wrighton: General Chemistry, Houghton, Dallas, 1987

Selected Classic Papers from the History of Chemistry

(<http://web.lemoyne.edu/~GIUNTA/papers.html>)

Chemistry, the Central Science 7/e by Brown, LeMay, and Bursten

(<http://cwx.prenhall.com/bookbind/pubbooks/blr/>)

Student Website for Chemistry: The Science in Context

(<http://www2.wwnorton.com/college/chemistry/gilbert/home.htm>)

alphaDictionary.com • Free Chemistry Dictionary

(http://www.alphadictionary.com/directory/Specialty_Dictionaries/Chemistry/)

Tantárgy neve: Sugárvédelem

Kredit: 2

Tantárgyfelelős: Homonnay Zoltán egyetemi tanár

A tantárgyfelelős tanszéke: Analitikai Kémiai Tanszék

Előadó: Dr. Fehér István c. egyetemi docens

Előtanulmányi feltételek: a vegyész MSc. belépési követelményei, magkémiai alapismeretek (ELTE kémia BSc. elvégzése esetén: A Magkémia alapjai, KA2MG1; másoknak: ezzel ekvivalens ismeretek)

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

A radioaktív sugárzás és az anyag kölcsönhatása. Dózisfogalmak a dózismérés elve, dózismérők típusai. A radioaktív sugárzás biológiai hatásai A sugárvédelem alapelvei. Külső és belső dózisterhelés meghatározása. A természetes és mesterséges eredetű dózisterhelés forrásai. A nukleáris fűtőanyagciklus és az atomreaktorok működése. A reaktorok dinamikus viselkedése és a szabályozás kritikus pontjai, balesetek. A fűtőanyagciklus hulladékainak csoportosítása és kezelése (temetés, tárolás). A nukleáris energiatermelés biztonsága növelésének és a hulladékelhelyezés megoldásának lehetséges jövőbeli módszerei. A nukleáris környezetellenőrzés módszerei és gyakorlata.

Kötelező irodalom:

Kiss István, Vértes Attila: Magkémia I., Tankönyvkiadó, Budapest, 1975

Ajánlott irodalom:

Kanyár B., Béres Cs., Somlai J., Szabó S.: Radioökológia és környezeti sugárvédelem (Tankönyv, 257 old.). Veszprémi Egyetemi Kiadó, Veszprém, 2000.

Tantárgy neve: Szinkrotron- és neutronsugárzás alkalmazása a kémiai szerkezetvizsgálatban

Kredit: 2

Tantárgyfelelős: Vankó György tud. főmunkatárs

A tantárgyfelelős tanszéke: külsős (MTA RMKI)

Előtanulmányi feltételek: alapvető magkémiai és kvantummechanikai (elméleti kémiai) ismeretek

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Szinkrotronsugárzás keletkezése, tulajdonságai; a röntgenoptika alapjai. Spektroszkópiás és diffrakciós módszerek nagy intenzitású röntgensugárzással.

Neutronsugárforrások, neutronoptika alapjai, neutronok detektálása. Neutron-anyag kölcsönhatások leírása; neutronszórás használata szerkezetmeghatározásra. Kémiai analízis neutronaktivációval.

Kötelező irodalom:

Az előadás jegyzetelt anyaga ill. kiosztott segédanyagok.

Ajánlott irodalom:

Válogatott angol nyelvű összefoglalók ill. cikkek (internetről letölthetők).

Tantárgy neve: Szol-gél módszer

Kredit: 2

tantárgyfelelős neve/tanszéke: Sinkó Katalin

Analitikai Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: szerves kémia, kolloidkémia

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

A szol-gél módszer egyrészt az üveg és kerámia ipar hagyományos, nagy energiaigényű, olvasztásos technikáit képes kiváltani, másrészt előre eltervezett, kontrollált szerkezetű és tulajdonságú anyagok új előállítási technikája. Az előadás tematikája felöleli a szilikátrendszerek hidrolízisét és kondenzációját, nem szilikáतालपु (pl. alumínát, borát, cirkonát, titanát) rendszerek gélesítés során lejátszóó folyamatait, a gélesedés kinetikáját, a gélek szárítását, szinterelését, konvencionális olvasztott és szol-gél módszerrel előállított termékek összehasonlítását.

Kötelező irodalom:

Brinker, C. J.; Scherer, G. W. *Sol-gel Science*; Academic Press: Boston, 1990.

Ajánlott irodalom:

R. W. Cahn: *The coming of materials science*, Pergamon, Amsterdam,

W. D. Callister: *Materials Science and Engineering, An Introduction*, Wiley,

W.F. Smith: *Principles of Materials Science and Engineering*, McGraw-Hill Publ.

Tantárgy neve: Szupramolekuláris rendszerek egyensúlyi vizsgálata

Kredit: 2

Tantárgyfelelős: Barczáné Buvári Ágnes egyetemi docens

tantárgyfelelős neve/tanszéke: Analitikai Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: alapvető szervetlen, szerves és analitikai kémiai ismeretek

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

A látszólagos stabilitási állandó értelmezése szupramolekuláris rendszerekben.

Speciáció – példákkal.

A stabilitási állandók meghatározásának (speciális) módszerei és veszélyeik.

Oldhatóságmérés – kalorimetria – NMR – kapilláris elektroforézis – potenciometria – spektrofotometria.

Néhány egyensúly részletesebb tárgyalása: fenoltalein és néhány származékának kölcsönhatása ciklodextrinekkal; szervetlen ionok, azofestékek, p-nitrofenol, savak és bázisok, C₆₀ fullerén, stb. ciklodextrin komplexei. A szubsztitúció fokának (DS) és minőségének hatása a stabilitási állandókra (és egyéb jellemzőkre. A GES (guest enforced solubility) elmélet és alkalmazása.

Kötelező irodalom:

Ajánlott irodalom:

M.T. Beck - I. Nagypál: Coordination Chemistry, John Wiley, Chichester, 1990

J. Szejtli and T. Osa (Eds.) Cyclodextrins. In: J.-M. Lehn, J.L. Atwood, J.E.D. Davies, D.D. MacNicol and F. Vögtle (Eds.): Comprehensive supramolecular chemistry, Vol. 3, Pergamon, Oxford 1989

V.T. D'Souza and K.B. Lipkowitz (Eds.): Cyclodextrins, Chemical Reviews, **98** (1998) 1741-2076 [<http://pubs.acs.org>]

Tantárgy neve:	Talaj és környezet
-----------------------	---------------------------

Kredit:	2
tantárgyfelelős neve/tanszéke:	Papp Sándor, Környezet- és Tájföldrajzi Tszk.
Előtanulmányi feltételek:	

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

A talajképződés természeti és antropogén tényezői, ill. előkészítő folyamatai: kőzetaprózódás, mállás. Agyagásvány-képződés, agyagásvány-típusok. A talaj szerves anyagai, szerepük a talajképződésben és a talajtulajdonságok kialakításában. Talajfejlődés; talajképződési folyamatok és társulásaik. Magyarország talajainak genetikai-talajföldrajzi osztályozási rendszere: a talajtípusok képződésének feltételei, folyamatai.

A víz- és a szélrózió kiváltó és befolyásoló tényezői. A legelterjedtebb hazai talajtípusok eróziódinamikája, veszélyeztetettsége; védelmük kérdései.

Az antropogén tevékenység (felszínformálás, talajművelés, műtrágyázás, gyomirtás, vízrendezés, öntözés, szennyvíz-, ill. hígtrágya-hasznosítás) talajtani hatásai. A savanyú és szikes talajok képződési feltételei, fizikai, kémiai és biológiai tulajdonságai, megjavításuk módjai, eljárásai.

Kötelező irodalom*:

Stefanovits P. et al. 1977. Talajvédelem, környezetvédelem. – Mezőgazdasági Könyvkiadó, Budapest.

Stefanovits P.–Filep Gy.–Füleky Gy. 1999. Talajtan. – Mezőgazda Kiadó, Budapest.

Ajánlott irodalom:

Papp S. 2003. A talaj mint megújuló és mint megújítható erőforrás. A földhasználat. – In: Bora Gy.–Korompai A. (szerk.): A természeti erőforrások gazdaságtana és földrajza (2., javított kiadás). – Aula Kiadó, Budapest. pp. 222–259.

* Együtt 3-5 könyv, jegyzet.

Tantárgy neve: Toxikológia

Kredit: 2

Tantárgyfelelős: Sohár Pálné (Országos Élelmiszerbiztonsági és Táplálkozástudományi Intézet)

A tantárgyfelelős tanszéke: Analitikai Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: a vegyész MSc. belépési követelményei

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Az élelmiszer szennyezőanyagok forrásai. Toxikológiai alapfogalmak. Kockázatelemzés. Jelenlegi szennyezőanyag szintek az élelmiszerekben, a csökkentés lehetőségei. A mintavétel és vizsgáló módszerek követelményei. Monitoring vizsgálatok tervezése.

Kötelező irodalom:

Sohár Pálné: Kémiai, toxikológiai veszélyek

In: Élelmiszerbiztonság és Táplálkozás-egészségügy (szerk: Rodler Imre) 153-294 old. jegyzet az élelmiszerbiztonsági felügyelő képzéshez
OKK-OÉTI Budapest 2003. (CD-n átadva)

Ajánlott irodalom:

Joint FAO/WHO Expert Committee on Food Additives jelentései (Food Additives Series 1-52) WHO, Geneva

Environmental Health Criteria (EHC) No 1, 3, 18, 85, 86, 134, 135, 202

WHO, Geneva 1977-1998.

Tantárgy neve: Válogatott analitikai módszerek

Kredit: 4

Tantárgyfelelős: Záray Gyula, egyetemi tanár

A tantárgyfelelős tanszéke: Analitikai Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: a vegyész MSc belépési követelményei

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása: az analitika modern módszereinek bemutatása, környezeti-, élelmiszer-, törvényszéki-, bűnügyi- és gyógyszerminták szerves és szervetlen szennyezőinek meghatározására alkalmas mérés technikák bemutatása, analitikai teljesítőképességeik összehasonlítása és az EU által megfogalmazott analitikai követelményekhez való illeszkedésük.

Kötelező irodalom*:

Az elemanalitika korszerű módszerei, Szerk.: Záray Gyula, Akadémiai Kiadó, 2006
Applied Spectroscopy, Eds: J. Workman, A. Springsteen, Academic Press, 1998
Handbook of Environmental Speciation I: Techniques and Methodology, Eds.: R. Cornelis, J. Caruso, H. Crews, K. Heumann, Wiley, 2005

Ajánlott irodalom:

Umweltanalytik und Ökotoxikologie, Eds.: S. Holler, C. Schaefer, J. Sonnenberg, Springer, 1996
Fernmessung von Luftverunreinigungen, Ed.: V. Klein, Ch. Werner, Springer-Verlag, 1993

Tantárgy neve: A vízminőség monitorozási módszerei

Kredit: 2

Tantárgyfelelős: Óvári Mihály

A tantárgyfelelős neve/tanszéke: Szerves Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: BSc. szintű analitikai kémiai és környezetkémiai ismeretek

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Felszíni vizek és jellemzésük. A vízminőség fogalma és összetevői. Biológiai és kémiai minősítés. Mintavételi módszerek, mintaelőkészítés, elemzés, az adatok statisztikai kiértékelése, gyakorlati példák

Ajánlott irodalom:

Záray Gy. (szerk.): Az elemanalítika korszerű módszerei, Akadémiai, 2006.

Felföldy L.: A biológiai vízminősítés. 4. kiad. In: Vízügyi Hidrobiológia 16. VGI, Budapest, 1987.

Dévai Gy. (szerk.): Vízminőség és ökológiai vízminősítés. Acta biol. debrecina, Suppl. oecol. hung. 4, 1992

Dévai Gy., Végvári P., Nagy S., Bancsi I. (szerk.): Az ökológiai vízminősítés elmélete és gyakorlata. 1. rész. – Acta biol. debrecina, Suppl. oecol. hung. 10/1, 1999.

Víz Keretirányelv - 2000/60/EK Irányelv. – Angol-magyar nyelvű, 2002. február 24-i változat. BMKE, Budapest.

Tantárgy neve: Alkalmazott katalízis

Kredit: 2

tantárgyfelelős neve/tanszéke: Kotschy András egyetemi docens, Szervetlen Kémia Tanszék

Előtanulmányi feltételek: a vegyész MSc. belépési követelményei, alapvető szerves, szervetlen és fémorganikus kémiai ismeretek (ELTE kémia BSc. elvégzése esetén: eredményes vizsga szerves kémia, szervetlen kémia tárgyakból, másoknak: ezzel ekvivalens ismeretek)

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Fémorganikus kémiai alapfogalmak, a katalízis alapjai, olefinek hidrogénezése, aszimmetrikus hidrogénezés, hidroformilezési reakciók, hidroaminálás, aminokarbonilezés, alkoxikarbonilezés, dekarbonilezés, keresztkapcsolási reakciók, allilkomplexek reakciói, metatézis

Kötelező irodalom*:

Faijl 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

Tantárgy neve: Aszimmetrikus szintézisek

Kredit: 2

tantárgyfelelős neve/tanszéke: Timári Géza/ Chinoín Rt.

Előtanulmányi feltételek: a vegyész MSc. belépési követelményei, alapvető szerves (ELTE kémia BSc. elvégzése esetén: eredményes vizsga szerves kémia, másoknak: ezzel ekvivalens ismeretek)

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Gyakorlati módszerek alkalmazása a sztereoselektív szintézisekben. Az anyag ismerteti a különböző aszimmetrikus redukciós és oxidációs eljárásokat, valamint kitér az aszimmetrikus szén-szén kötés kialakítására is.

Kötelező irodalom*:

Mihály Nógrádi, Stereoselective Synthesis, VCH, 1995

Ajánlott irodalom:

A. Kotschy, G. Timári, Heterocycles from Transition Metal Catalysis, *Springer*, 2005

Tantárgy neve: Asztrókémia

Kredit: 2

tantárgyfelelős neve/tanszéke: Tarczay György / Szervetlen Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: általános kémia, elméleti kémia, fizikai kémia (reakciókinetika)

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Csillagászati alapismeretek. A Világegyetem keletkezése. A Világegyetem mai szerkezete. Ősrobbanás, nukleoszintézis. Elemek eloszlása a Világegyetemben. A csillagászati spektroszkópia alapjai. Abszorpció, emisszió, stimulált emisszió. Források. Optikai sűrűség, kritikus sűrűség. Doppler-eltolódás. Távolság és anyagmennyiség meghatározása. Asztronómiai mézerek és lézerek. Spektrumok felvétele. A földi légkör spektroszkópiai ablakjai. Teleszkópok alapfelépítése. Rádió, IR, UV-látható és röntgéntávcsövek. Térbeli és spektrális felbontás. Földi és műholdas megfigyelések. (ISO, IRAS, Hubble, ...) Csillagászati spektrumok értékelése. Laboratóriumi kísérletek reaktív és egyéb asztrókémiai specieszek vizsgálatára. Elméleti számítások. Számítások pontossága. A csillagközi anyag, felhők (Interstellar Medium, ISM). A felhők osztályozása. Az ISM-ben megfigyelt molekulák. Kémiai és fizikai folyamatok, kinetikai modellek. Reakciók kinetikája. Fotokémiai, ionos és szemcsék felületén végbemenő folyamatok. Laboratóriumi kísérletek Csillagok születése. Kémiai folyamatok csillagok keletkezésékor. A Naprendszer születése. A Föld keletkezése. Geokémiai evolúció. A Föld légköri összetételének változása. Fontosabb légköri folyamatok. Légköri folyamatok spektroszkópiai megfigyelése. Üstökösök és meteoritok kémiája. A Mars, Vénusz és a Jupiter-típusú bolygók, és fontosabb holdak (Hold, Ió, Európa, Titán) kémiája. Missziók, ezek eredményei. Geokémia, légkör. Asztrobiológia. Az élet keletkezésének elméletei. Kutatás biomolekulák után. Az enantiomer-egyensúly eltolódásának lehetséges okai. A Müller-féle kísérlettől a Gánti-féle chemoton elméletig. Élet a Marson? (Mikrobáktól a Mars benépesítésének lehetőségéig.)

Kötelező irodalom*:

Ajánlott irodalom:

J. Tennyson: *Astronomical Spectroscopy* (Imperial College Press, 2005.)

T. W. Hartquist, D. A. Williams: *The Chemically Controlled Cosmos* (Cambridge University Press, 1992.)

A. M. Shaw: *Astrochemistry, From Astronomy to Astrobiology* (Wiley, 2006.)

Chemical Evolution of the Universe, Faraday Discuss. 2006.

E. Herbst: *The Chemistry of Interstellar Space, Chem. Soc. Rev.* 2001, 30, 168–176.

Tantárgy neve: Bevezetés a szilíciumorganikus kémiába

Kredit: 2

tantárgyfelelős neve/tanszéke: Szalay Roland / Szervetlen Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: szervetlen kémia, szerves kémia

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

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. sztereoselektív szililezési eljárások.

A Si-organikus vegyületek alkalmazása az anyagtudományokban. A szilszeszkvioxánok jelentősége.

Bevezetés a bioszilíciumorganikus kémiába. Si-tartalmú gyógyszerek.

Kötelező irodalom*:

Ajánlott irodalom:

Greenwood - Earnshaw: Az elemek kémiája (Nemzeti Tankönyvkiadó, 1999)

Elschenbroich – Salzer: Organometallics (Verlag Chemie, 1992)

Auner – Weis: Organosilicon Chemistry 5- From Molecules to Materials (John Wiley & Sons, 2003)

Comprehensive Organometallic Chemistry II: Silicon Group, Arsenic, Antimony and Bismuth (ed. A.G. Davies, Pergamon, 1995)

The Chemistry of Organic Silicon Compounds (eds Z. Rappoport, Y. Apeloig, John Wiley & Sons, 2001)

Tantárgy neve: A fotoionizáció spektroszkópiai alkalmazásai

Kredit: 2 kredit

tantárgyfelelős neve/tanszéke: Szepes László egyetemi tanár

Szervetlen Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: a vegyész MSc belépési követelményei, alapvető elméleti kémiai és spektroszkópiai ismeretek (ELTE kémia BSc elvégzése esetén: Elméleti kémia 1 (kv1n11m1); másoknak ezzel ekvivalens ismeretek)

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

a fotoionizáció alapjelensége, alapelvek és definíciók, a fotoelektron-spektroszkópia (UPS), a kísérleti berendezés, a fotoelektron spektrum és a spektrumsávok alakját befolyásoló tényezők, a fotoelektron-spektrumok értelmezése, legfontosabb kémiai alkalmazások, a fejlesztés fő irányai: zérus kinetikus energiájú elektronok vizsgálatán alapuló technika (ZEKE), fotoelektron-fotoion koincidencia (PEPICO) a fotoionizációs tömegspektrometria speciális vonásai és alkalmazásai, Röntgengerjesztéses fotoelektron-spektroszkópia (XPS).

Kötelező irodalom:

Borossay J., Szepes L., Fotoelektron-spektroszkópia. Molekulaspektroszkópia, Szerk.:

Kovács I., Szőke J., Akadémiai Kiadó, Budapest, 1987, 719-761.

Eland, J.H.D., Photoelectron Spectroscopy, Butterworth, London, 1974.

Ajánlott irodalom:

Briggs, D. (Ed.), Handbook of X-ray and Ultraviolet Photoelectron Spectroscopy, Heyden, London, 1977.

Müller-Detlefs, K., High Resolution with Photoelectrons: ZEKE Spectroscopy of Molecular Systems, in *High Resolution Laser Photoionization and Photoelectron Studies*, (Powis, I., Baer, T., Ng, C-Y., Editors), Wiley, 1995, pp. 21-70.

Baer, T., Booze, J., and Weitzel, K.-M., Photoelectron-Photoion Coincidence Studies of Ion Dissociation Dynamics, in *Vacuum Ultraviolet Photoionization and Photodissociation of Molecules and Clusters*, (Ng, C-Y., Ed.) World Scientific, Singapore, 1991, pp. 259-296.

Tantárgy neve: Korszerű tömegspektrometria a biokémiában

Kredit: 2

tantárgyfelelős neve/tanszéke: Frigyes Dávid (Szabó Pál)

adjunktus, Szervetlen Kémiai Tanszék

Szabó Pál, tud. Főmunkatárs

MTA Kémiai Kutatóközpont

Előtanulmányi feltételek:

A kurzus az alapoktól indul, csupán szerves kémiai alapismereteket igényel.

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

A kurzusban többek közt a következő témákról lesz szó: Bevezetés: ionizációs technikák és analizátorok összehasonlítása a biomolekulák “szemszögéből”; mikromennyiségek mintaelőkészítése; intakt fehérjék vizsgálata; enzimatis és kémiai hasítások oldatban és gélben; peptidterkép készítése, szekvenciameghatározás; kromatográfia a mikro illetve nano tartományokban; peptidek tandem tömegspektrometriás szekvenálása; poszttranszlációs módosítások vizsgálata: metilálás, diszulfid hidak, foszforilálás, glikozilálás; fehérjekomplexek vizsgálata; enzimek aktív centrumának meghatározása; nukleinsavak vizsgálata; metabolitok vizsgálata; metabolikus stabilitás mérése; célmolekulák vizsgálata: “multitarget screening”; orvosi diagnosztikai vizsgálati módszerek.

Kötelező irodalom*:

Az előadások anyagát a hallgatók nyomtatott formában megkapják.

<http://ms.elte.hu/bio>

Ajánlott irodalom:

Dinya Zoltán: Tömegspektrometria (Egyetemi jegyzet, Debrecen)

Tantárgy neve: Kromatográfias származékképzési eljárások

Tantárgy heti óraszám: 2 óra
kreditértéke: 2

tantárgyfelelős neve: Mörtl Mária

tanszéke: Szervetlen Kémiai Tsz.

számonkérés rendje: kollokvium

Előtanulmányi feltételek:

Elválasztástechnika előadás, ill. labor teljesítése (ELTE Kémia BSc) vagy azzal egyenértékű tanulmányok pl. Műszeres Analitika tárgy keretében.

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

A gázkromatográfiában, ill. a folyadékkromatográfiában előforduló problémák ismertetése, amelyekre a származékképzés adhat megoldást (pl. elválasztás javítása, detektálási határ csökkentése, stb.), legfontosabb származékképzési reakciók áttekintése különböző detektorok igényei (ECD, MS, stb.) szerinti, ill. vegyülettípusok szerinti csoportosításban, szililezés részletes tárgyalása (szililezőszerek előállítása, Si–O kötés stabilitása, szililezés mechanizmusa, a kereskedelemben kapható szililezőszerek összehasonlítása), királis származékképzés, származékképzési technikák összevetése (precolumn, on column, post column, stb.), gyakorlati példák bemutatása (pl. szteroidok, drogok, aflatoxin, stb.), kitekintés néhány határterületre (pl. ciklodextrinek a kapillárelektroforézisben, szililezés szerepe a felületek módosításában)

Kötelező irodalom:

Kremmer Tibor, Torkos Kornél, Szókán Gyula: Elválasztástechnikai módszerek elmélete és gyakorlata, ELTE, Eötvös Kiadó, Budapest, 2005 (egyetemi jegyzetben 2.3.8 és 5.1.7 alfejezetek), 20-26 és 64-72 o.

Ajánlott irodalom:

C. F. Poole, S. K. Poole: Chromatography today, Elsevier, Amsterdam, 1991, 848-892 o.

Pierce Chromatography Catalog and Handbook, Rockford, 2003, www.piercenet.com

<http://www.registech.com/chromatography>

<http://probes.invitrogen.com/handbook>

D. R. Knapp: Handbook of Analytical Derivatization Reactions, John Wiley and Sons, 1979

Tantárgy neve: Lézerek a kémiában

Kredit: 2

tantárgyfelelős neve/tanszéke: Tarczay György / Szervetlen Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: elméleti kémia (spektroszkópia)

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Lézerek felfedezésének története. Lézerek főbb alkalmazási területei. Lézerek működésének elve. Lézerek felépítése, főbb lézertípusok. Lézerek veszélyességi osztályai. Lézersugárzás átalakítás: polarizáció, rövid impulzusok, frekvenciakonverzió. Lézerspektroszkópiai módszerek és alkalmazási területeik: abszorpció sokreflexiós cellákban, CRDS, ICLAS, FM detektálás, termikuslencse spektroszkópia, optotermikus spektroszkópia, fotoakusztikus spektroszkópia, optogalvanikus spektroszkópia, LMR, LSS, Lamb-dip, LIF, LI-DFS, egymolekula spektroszkópia, SEP, REMPI, ZEKE, MATI (energia- és tömegszelekció), Raman, SERS, nemlineáris Raman-technikák. MALDI, lézeres elpárologtatás, abláció. Lézerek preparatív alkalmazása, izotópszeparáció. Lézerek légköranalitikai alkalmazásai: DOAS, különféle LIDAR technikák. Gyors kinetikai mérések és kvantumkontroll. Atomok hűtése lézerral, atomórák. Asztrokémiai mézerek és lézerek.

Kötelező irodalom*:

Ajánlott irodalom:

William T. Silfvast: *Laser Fundamentals*, Cambridge University Press, 2nd ed. 2004.

David L. Andrews: *Lasers in Chemistry*, Springer, 1997.

Halina Abramczyk: *Introduction to Laser Spectroscopy*, Elsevier, 2005.

Gerald R. Van Hecke and Kerry K. Karakstis: *A Guide to Lasers in Chemistry*, Jones and Bartlett Publishers, 1998.

Anne B. Myers, Thomas R. Rizzo (Editors): *Laser Techniques in Chemistry*, Wiley, 1995.

Ahmed H. Zewail: *Laser Chemistry Applications*, (Photochemistry and Photobiology, Vol.1.), Gordon & Breach Publishing Group, 1983.

Tantárgy neve: Modern szintézismódszerek

Kredit: 2

tantárgyfelelős neve/tanszéke: Kotschy András egyetemi docens, Szervetlen Kémia Tanszék

Előtanulmányi feltételek: a vegyész MSc. belépési követelményei, alapvető szerves kémiai ismeretek (ELTE kémia BSc. elvégzése esetén: eredményes vizsga szerves kémiából, másoknak: ezzel ekvivalens ismeretek)

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

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

Tantárgy neve: Modern szintézismódszerek laborgyakorlat

Kredit: 8

tantárgyfelelős neve/tanszéke: Kotschy András egyetemi docens, Szervetlen Kémia Tanszék

Előtanulmányi feltételek: a vegyész MSc. belépési követelményei, alapvető szerves és kémiai ismeretek (ELTE kémia BSc. elvégzése esetén: eredményes szerves kémia vizsga és laborgyakorlat)

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Számítógépes irodalmazás
Szintézisek mikro méretben
Szintézisek inert körülmények között
Szintézisek alternatív oldószerekben
Szintézisek extrém körülmények (nyomás, hőmérséklet) között
Robotizált szintézisek

Kötelező irodalom*:

Ajánlott irodalom:

Tantárgy neve: A molekuláris felismerés alapjai

Kredit: 2

tantárgyfelelős neve/tanszéke: Kele Péter egyetemi tanársegéd, Szervetlen Kémia Tanszék

Előtanulmányi feltételek: a vegyész MSc. belépési követelményei, alapvető analitikai, szerves és szervetlen kémiai ismeretek (ELTE kémia BSc. elvégzése esetén: eredményes vizsga szerves kémia, szervetlen kémia tárgyakból, másoknak: ezzel ekvivalens ismeretek)

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

A tantárgy célja, hogy megismertesse a hallgatókkal a molekuláris felismerésen alapuló szenzorok működési elvét, különös tekintettel a különböző típusú fluoreszcens szenzorokra.

Tematika:

- 1. A fluoreszcencia alapjelenségei, n- π szenzorok**
- 2. belső töltésátviteli (ICT) szenzorok**
- 3. Kettős fluoreszcencia jelensége, kettős fluorofórok**
- 4. Fotoindukált elektrontranszfer (PET) szenzorok I. OFF-ON rendszerek**
- 5. PET szenzorok II. ON-OFF rendszerek**
- 6. PET szenzorok III. redox aktív vendégmolekulák**
- 7. Excimer és energiáttranszfer szenzorok**
- 8. Királis felismerés**
- 9. Logikai kapcsolók**
- 10. Quantum Dots;**

Kötelező irodalom*:

Chem. Rev. **1997**, *97*, 1515; Valeur, B. *Molecular Fluorescence*, Wiley-VCH, Weinheim, 2001; *Chem. Eur. J.* **2004**, *10*, 574;

Tantárgy neve: Molekuláris szenzorika labor

Kredit: 4

tantárgyfelelős neve/tanszéke: Kele Péter egyetemi tanársegéd, Szervetlen Kémia Tanszék

Előtanulmányi feltételek: a vegyész MSc. belépési követelményei, alapvető analitikai, szerves, szervetlen és fémorganikus kémiai ismeretek (ELTE kémia BSc. elvégzése esetén: eredményes vizsga szerves kémia, szervetlen kémia tárgyakból, másoknak: ezzel ekvivalens ismeretek). Sikeres vizsga a molekuláris felismerés alapjai c. tantárgyból.

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Szenzortervezés és szintézis.

Szenzorok izolálása, tisztítása és teljeskörű karakterizálása (analitikai)

A szenzorok spektrofotometriai, fluorimetriás jellemzése

A szenzorok tesztelése.

Kötelező irodalom*:

Chem. Rev. **1997**, *97*, 1515; Valeur, B. *Molecular Fluorescence*, Wiley-VCH, Weinheim, 2001; *Chem. Eur. J.* **2004**, *10*, 574;

Tantárgy neve: Molekulaspektroszkópia gyakorlatok

Kredit: 6

tantárgyfelelős neve/tanszéke: Tarczay György / Szervetlen Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: Modern szerkezetvizsgáló módszerek előadás és modern szerkezetvizsgáló módszerek laborgyakorlat teljesítése.

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

A gyakorlat célja az optikai spektroszkópai módszerek (IR-, Raman-, UPS-, valamint CD spektroszkópia) alaposabb megismerése, a különböző mérési berendezésekkel, felvételi technikákkal és vezérlő szoftverekkel kapcsolatos ismeretek olyan szintű elsajátítása, hogy a hallgató önállóan is képes legyen mérési feladatok tervezésére, elvégzésre és azok eredményeinek feldolgozására, kiértékelésére.

Kötelező irodalom*:

Ajánlott irodalom:

Kovács I., Szőke J.: Molekulaspektroszkópia, Akadémiai Kiadó, Budapest, 1987.

Holly Sándor, Sohár Pál: Infravörös spektroszkópia, Műszaki Kiadó, 1968.

B. Schrader (szerk.): Infrared and Raman Spectroscopy, Methods and Applications, VCH, 1995

Tantárgy neve: Névreakciók a szerves szintézisekben

Kredit: 2

tantárgyfelelős neve/tanszéke: Novák Zoltán, Szervetlen Kémia Tanszék

Előtanulmányi feltételek: a vegyész MSc. belépési követelményei, alapvető szerves kémiai ismeretek (ELTE kémia BSc. elvégzése esetén: eredményes vizsga szerves kémia, másoknak: ezzel ekvivalens ismeret)

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Az alapkollégiumban nem szereplő szerves kémiai névreakciók bemutatása és alkalmazásaik ismertetése komplex molekulák szintézisében.

Kötelező irodalom*:

Smith, M. B.; March's Advanced Organic Chemistry: Reactions, Mechanisms, and Structure

Ajánlott irodalom:

Tantárgy neve: NMR- és MS-spektroszkópia, röntgendiffrakció

Kredit: 6

tantárgyfelelős neve/tanszéke: Rohonczy János / Szervetlen Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: Modern szerkezetvizsgáló módszerek előadás és modern szerkezetvizsgáló módszerek laborgyakorlat teljesítése.

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

A gyakorlat célja az NMR, MS és Röntgendiffrakciós módszerek elmélyült megismerése, a különböző mérési berendezésekkel, felvételi technikákkal és vezérlő szoftverekkel kapcsolatos ismeretek olyan szintű elsajátítása, hogy a hallgató önállóan is képes legyen mérési feladatok tervezésére, elvégzésre és azok eredményeinek feldolgozására, kiértékelésére. Az NMR gyakorlatok felölelik a legfontosabb egy- és kétdimenziós, oldat- és szilárdfázisú, homo- és heteronukleáris NMR kísérletfajták megismerését és gyakorlatban történő elsajátítását.

A Röntgendiffrakciós gyakorlat célja a kismolekulás és fehérjekrisztallográfiai szerkezetmeghatározás lépéseinek gyakorlati elsajátítása, molekulák megjelenítése, krisztallográfiai adatbankok megismerése és használata.

Kötelező irodalom*:

Ajánlott irodalom:

P.J. Hore: Mágneses Magrezonancia, Fordító. Dr. Szilágyi László,
Nemzeti Tankönyvkiadó, Budapest, 2004.

Rohonczy János: Szilárd anyagok szerkezetvizsgálata MQMAS NMR módszerrel,
KUE 95, Akadémiai Kiadó, Budapest, 2006.

Kovács I., Szőke J.: Molekulaspektroszkópia, Akadémiai Kiadó, Budapest, 1987.

S. Berger, S. Braun: 200 and More NMR Experiments, Wiley-WCH, 2004.

Tantárgy neve: Az NMR spektroszkópia elmélete és gyakorlati módszerei

Kredit: 2

tantárgyfelelős neve/tanszéke: Rohonczy János / Szervetlen Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: a vegyész MSc. belépési követelményei

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Az NMR alapjelenség értelmezése vektormodellel, Hilbert-térben, Liouville-térben és szorzatoperátor-formalizmussal. Adatgyűjtés kvadrátúra-detekcióval. Jelfeldolgozás: FFT, Hilbert-trf., Laplace-trf, lineáris predikció. Polarizációs-transzfer kísérletek, adiabatikus pulzusok alkalmazása. A dinamikus NMR és NOE jelenségek mérése és az azokat leíró modellek. Modern 2D NMR kísérletek: inverz-detekció, gradiens-szelekció és szelektív pulzusok alkalmazása. Diffúziós NMR kísérletek.

Kötelező irodalom*:

<http://vegyszer.chem.elte.hu/nmredu/index.html>

Ajánlott irodalom:

P.J. Hore: Mágneses Magrezonancia, Fordító: Dr. Szilágyi László, *Nemzeti Tankönyvkiadó*, Budapest, 2004.

Atta-ur-Rahman: One and Two Dimensional NMR Spectroscopy, *Elsevier*, 1989.

S. Berger, S. Braun: 200 and More NMR Experiments, Wiley-WCH, 2004.

Tantárgy neve: NMR spektroszkópia I. Elméleti alapok

Kredit: 2

tantárgyfelelős neve/tanszéke: Sohár Pál / Ált. és Szervetlen Kémia

Előtanulmányi feltételek: Fiz.-Kém. és Szerves Kém. kollokviumok

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

1. Elméleti alapok. Részecskék mágneses tulajdonságai Mágneses- és impulzus momentum és kvantált természetük Larmor precesszió Mágneses energianívók és átmenetek Term- gyakorlatias Boltzman megoszlás Spin-hőmérséklet Relaxációk Telítés Természetes vonalszélesség Bloch egyenletek Jelintenzitás.

2. Kémiai eltolódás. Definíció Elméleti számítása, összetevői: dia- és paramágneses hozzájárulás, szomszédcsoportok anizotrop hatása Intramolekuláris (aromás) köráramok A kémiai eltolódások additivitása, korrelációs táblázatok Kémiai eltolódáskálák, kalibráció.

3. Spin-spin kölcsönhatások, csatolási állandók. Elsőrendű felhasadás, multiplicitás- és intenzitásszabályok Csatolási állandók és a nagyságukat megszabó tényezők Magasabbrendű kölcsönhatások Két és három kötésen át létrejövő HH-kölcsönhatások, távolható csatolások Kémiai és mágneses ekvivalencia, spin-rendszerek.

4. Az NMR spektrumok kvantumkémiai értelmezése Spinrendszerek Schrödinger egyenlete Hamilton operátor -Spin-impulzus-operátorok Spinrendszerek sajátfüggvényei Többspin-rendszerek Kiválasztási szabályok Átmeneti valószínűség és a spektrumvonalak intenzitása.

5. A leggyakoribb spin-rendszerek kvantumkémiai tárgyalása. A_2 A_X A_B A_{X_2} A_{B_2} A_2X_2 A_2B_2 A_X^3 A_B^3 A_2X_3 A_2B_3 A_MX A_BX A_{BC} $A_A'X_X'$ $A_A'B_B'$. Elméleti spektrumok. A spektrumparaméterek kiszámítása.

Kötelező irodalom*:

Sohár P.: Mágneses magrezonancia-spektroszkópia, I. Az NMR spektroszkópia elmélete. (Egyetemi jegyzet). Tankönyvkiadó, Budapest, 1975

Sohár P.: Feladatgyűjtemény, I. A „Mágneses magrezonancia-spektroszkópia” című speciálkollégium első félévi (Az NMR spektroszkópia elmélete) anyagához.

(Egyetemi jegyzet). Tankönyvkiadó, Budapest, 1981, második kiadás, 1996

Sohár P.: Mágneses magrezonancia-spektroszkópia, I-II.

Akadémia Kiadó, Budapest, 1976

Ajánlott irodalom:

J. T. Clerc, E. Pretsch, J. Seibl: Structural Analysis of Organic Compounds by Combined Application of Spectroscopic Methods.

Tantárgy neve: NMR spektroszkópia, II. Alkalmazások a szerkezetkutatásban.

Kredit: 2

tantárgyfelelős neve/tanszéke: Sohár Pál / Ált. és Szervetlen Kémia

Előtanulmányi feltételek: NMR spektroszkópia, I. kollokvium

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Hidrogén-rezonancia. Telített nyíltláncú és gyűrűs, ill. heterogyűrűs vegyületek Olefinek és acetilének Aromások Heteroaromás vegyületek Mozgékony hidrogéneket tartalmazó és flexibilis molekulák spektrumá Jelalak-analízis Termodinamikai paraméterek NMR-meghatározása.

2. Szénrezonancia-spektroszkópia. A széneltolódásokat megszabó tényezők Téreffektus Különböző vegyülettípusok C-NMR jellegzetességei. A szénmagok csatolásai Szén-relaxációk Relaxációs mechanizmusok.

3. Közeghatások az NMR spektroszkópiában. Oldószerhatások Siftreagensek Kémiaailag indukált magpolarizáció (CIDNP).

4. NMR-méréstechnika. CW-készülékek Integrált spektrum Hőmérsékletfüggés vizsgálata FT-spektroszkópia Pulzusgerjesztés Számítógép-vezérlés Kettősrezonancia-módszerek NOE kapuzott lecsatolások Pulzus-szekvenciák DEPT (szénatomok rendiségének mérése) Relaxációs idők mérése.

5. 2D-NMR spektroszkópia. COSY (proton-proton csatolási-korreláció) HSC (heteronukleáris siftkorreláció: jeltársítás) NOESY (NOE-korreláció) NMR-tomográfia: Orvosi alkalmazások.

Kötelező irodalom*:

Sohár P.: Válogatott fejezetek a modern NMR –spektroszkópiából. A kémia újabb eredményei, 58. (Szerk.: Csákvári Béla). Akadémia Kiadó, Budapest, 1984

Sohár P.: Szénrezonancia-spektroszkópia. A Kémia újabb eredményei, 59 (Szerk.: Csákvári Béla). Akadémia Kiadó, Budapest, 1984

Sohár P.: Mágneses magrezonancia-spektroszkópia, I-II. Akadémia Kiadó, Budapest, 1976

Ajánlott irodalom:

A. E. Derome: Modern NMR Techniques for Chemistry Research. Pergamon Press, Oxford, 1987

E. Breitmaier: Structure Elucidation by NMR in Organic Chemistry. Wiley, 1993

J. K. M. Sanders and B.K. Hunter: Modern NMR Spectroscopy. Oxford Univ. Press, 1987

Tantárgy neve: Optikai spektroszkópia

Kredit: 2

tantárgyfelelős neve/tanszéke: Magyarfalvi Gábor / Szervetlen Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek:

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Az ultraibolya, látható, infravörös, valamint a Raman és fluoreszcencia spektroszkópia jelensége és alapfogalmai. Az elektronátmenetek és a molekularezgések elméletének alapjai. A spektrométerek felépítése és működése. Mintakezelés és mérési technikák, kapcsolt módszerek. A spektrumok megjelenését meghatározó tényezők. A spektrumok értékelése és értelmezése.

Kötelező irodalom*:

Ajánlott irodalom:

Holly Sándor, Sohár Pál: *Infravörös spektroszkópia*, Műszaki, 1968

Kovács István, Szőke József: *Molekulaspektroszkópia*, Akadémiai, 1987

Sztraka Lajos: *A Fourier-transzformációs spektrometria elvi alapjai, A kémia újabb eredményei 36*, Akadémiai, 1977

Ruff Ferenc: *Szerves vegyületek szerkezetvizsgálata spektroszkópiai módszerekkel: Infravörös Spektroszkópia; Szerves vegyületek szerkezetvizsgálata spektroszkópiai módszerekkel: UV-látható spektroszkópia*, Tankönyvkiadó, 1992

J. M. Hollas: *Modern Spectroscopy*, Wiley, 1998

D. C. Harris, M. D. Bertolucci: *Symmetry and Spectroscopy, An Introduction to Vibrational and Electronic Spectroscopy*, Oxford University P., 1978

E. B. Wilson, J. C. Decius, P. C. Cross: *Molecular Vibrations, The Theory of Infrared and Raman Vibrational Spectra*, General Publ. Comp., 1955 (Dover)

B. Schrader (szerk.): *Infrared and Raman Spectroscopy, Methods and Applications*, VCH, 1995

Tantárgy neve: Összetett szintézis gyakorlat

Kredit: 8

tantárgyfelelős neve/tanszéke: Csámpai Antal egyetemi docens, Szervetlen Kémia Tanszék

Előtanulmányi feltételek: a vegyész MSc. belépési követelményei, alapvető szerves kémiai ismeretek (ELTE kémia BSc. elvégzése esetén: eredményes szerves kémia vizsga és laborgyakorlat)

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

többlépéses szintézisek egyéni kivitelezése (irodalmazás, szintézis-tervezés, intermedierek azonosítása, intermedierek tisztítása, végtermék tisztítása és jellemzése)

Kötelező irodalom*:

Ajánlott irodalom:

Tantárgy neve: Szerkezetkutatás spektroszkópiai módszerekkel

Kredit: 2

tantárgyfelelős neve/tanszéke: Csámpai Antal / Szervetlen Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: Az IR, Raman, VCD, UV-VIS, UPS, CD és NMR spektroszkópiai, valamint tömegspektrometriai módszerek elvi alapjainak ismerete.

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Az egyes módszerek gyakorlati alkalmazásához legszükségesebb elvi módszerek rövid áttekintése. Néhány, a szerves- szervetlen és fémorganikus kémiai szintetikus gyakorlatban előforduló probléma megoldása a kiindulási anyagok, termékek, és esetenként a lehetséges intermedierek szerkezetének meghatározásán keresztül, ami a fent említett módszerekkel kapott spektrumok komplementer információin alapul. A gyakorlat különös hangsúlyt fektet a multinukleáris NMR technikák alkalmazására.

Kötelező irodalom*:

Ajánlott irodalom:

J. T. Clerc, E. Pretsch and J. Seibl: Structural Analysis of Organic Compounds. Akadémiai Kiadó, Budapest, 1981.

Faigl Ferenc, Kollár László, Kotschy András, Szepes László: Szerves fémvegyületek kémiája, Nemzeti Tankönyvkiadó, Budapest 2001.

Sohár Pál: Mágneses magrezonancia spektroszkópia, Akadémiai Kiadó, Budapest, 1976.

Csámpai Antal, Jalsovszky István, Majer Zsuzsa, Orosz György, Rábai József, Ruff Ferenc, Sebestyén Ferenc: Szerves Kémiai Praktikum, Nemzeti Tankönyvkiadó, Budapest 1998.

Tantárgy neve: Szilárd anyagok NMR spektroszkópiája

Kredit: 2

tantárgyfelelős neve/tanszéke: Rohonczy János / Szervetlen Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: Rohonczy J.: Az NMR spektroszkópia elmélete és mérés technikája

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

A szilárd anyagokra jellemző mágneses kölcsönhatási formák és hatásuk az NMR spektrumokra. A kölcsönhatások leírása szferikus tenzor-reprezentációval. A kölcsönhatások csökkentése fizikai és spintérebén: mágikus szög körüli forgatás, WAHUA szekvencia. Keresztpolarizációs kísérletek elmélete és gyakorlata. Félegész spinű magok mérésének sajátos módjai: DAS, DOR, MQMAS és STMAS mérések. Az egész spinű magok mérésének gyakorlati korlátai. Korrelációs 2D kísérletek szilárd fázisban.

Kötelező irodalom*:

Jegyzet: <http://vegyszer.chem.elte.hu/solidnmr/index.html>

Ajánlott irodalom:

Rohonczy J.: Szilárd anyagok MQMAS NMR vizsgálata,

A kémia újabb eredményei 95, 2005, Akadémiai Kiadó, 2006.

S. Berger, S. Braun: 200 and More NMR Experiments, Wiley-WCH, 2004.

K.J.D. MacKenzie, M.E. Smith, Multinuclear Solid-State NMR of Inorganic Materials, Pergamon Press, 2002. (ISBN 0-08-043787-7)

Tantárgy neve: Tömegspektrometria

Kredit: 2

tantárgyfelelős neve/tanszéke: Vékey Károly, MTA Kémiai Kutatóközpont

Előtanulmányi feltételek: Kémia BSc szintű fizikai kémiai és szerves kémiai ismeretek

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

A tantárgy az egyik legfontosabb analitikai és szerkezetkutatási módszert, a tömegspektrometriát ismerteti meg a hallgatókkal. A tantárgy három fő részből áll. 1) Alapok. Ez a rész a tömegspektrometria alapfogalmait, a nagyműszer felépítését, hagyományos alkalmazásait ismerteti. 2) Modern tömegspektrometria. Az elmúlt évtized fejlesztéseinek legfontosabb új jellemzőit, kísérleti módszereit, lehetőségeit ismerteti. Kiemelt tárgykörök: új ionizációs módszerek (electrospray, MALDI), GC-MS, HPLC-MS, tandem tömegspektrometria. 3) Alkalmazási példák. Szemelvények a modern tömegspektrometria alkalmazásai közül. A példák illusztrálják a tömegspektrometria előző két részben ismertett lehetőségeit: Gyógyszermetabolizmus, élelmiszeranalitika, szennyezésvizsgálat, proteomika, orvosi diagnosztika, anyagtudományi (fém-, és polimeranalitikai) alkalmazások.

Kötelező irodalom*:

A hallgatók az előadás anyagát megkapják

Ajánlott irodalom:

Fred W. McLafferty, F. Turecek, Interpretation of Mass Spectra, 4th ed., University Science Books, Sausalito, 1994.

J. R. Chapman. Practical organic mass spectrometry. A guide of chemical and biochemical analysis. Wiley, Chichester, 2nd edn, 1993.

Tantárgy neve: Vákuumtechnika

Kredit: 2

Tantárgyfelelős neve/tanszéke: Frigyes Dávid, Szervetlen Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: A tantárgynak külön előfeltétele nincs

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

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://vakutech.elte.hu>

Ajánlott irodalom:

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

Tantárgy neve: Vázátrendeződések a heterociklusos kémiában

Kredit: 2

tantárgyfelelős neve/tanszéke: Csámpai Antal / Szervetlen Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: Sikeres vizsgák: Szerves Kémia, Fémorganikus kémia

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

A különböző gyűrűrendszerek átalakításainak szisztematikus áttekintése a heterogyűrűk tagszáma szerint csoportosítva. Az azonos típusú vegyületek átalakításai (elektrofil-, nukleofil- dienofil- és dipolarofil reagensekkel, fémtartalmú katalizátorokkal, valamint fotolitikus körülmények között) a szintetikus módszerek szerint alcsoportokra vannak felosztva. Az anyag tárgyalja az összetettebb szerkezetű kiindulási anyagként használt gyűrűrendszerek szintézisét is.

Kötelező irodalom*:

Ajánlott irodalom:

H. C. Van der Plas: Ring transformation of heterocycles I-II Academic Press, London and New York, 1973.

Tantárgy neve: Analógián alapuló gyógyszerkutatás

Kredit: 2

tantárgyfelelős neve/tanszéke: Majer Zsuzsa (Deckerné), Szerves Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: *kémia BSc., másoknak: ezzel ekvivalens szerves és biokémiai ismeretek*

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Analógok és az új gyógyszer viszonya. Kiváltságos szerkezetek és az analógok helyzete a gyógyszerkutatásban. Omeprazole-Esomeprazole és Pantoprazole története. Az antihipertenzív terápia optimalizálása angiotenzin receptor blokkoló vegyülettel. Lacidinpin esettanulmánya egy új kalcium-antagonisták kutatása során. Szelektív beta-adrenergikus receptor blokkoló anyagok. Szerves nitrátok alkalmazásának felfedezése szív koronaér betegségekre. Opioid receptor ligandumok felfedezése. Ciszplatin és analógjainak alkalmazása a rák kemoterápiában. Kortikoszteroidok: a természetes vegyületektől a hasznos analógokig.

Kötelező irodalom:

Analogue-based Drug Discovery (Editors: J. Fischer and C.R. Ganellin
Wiley-VCH (2006)
ISBN 3-527-31257-9

Ajánlott irodalom:

Tantárgy neve: Biológiailag aktív peptidek kémiai és funkcionális jellemzése *in vitro*

Kredit: 1

tantárgyfelelős neve/tanszéke: Bősze Szilvia/ tudományos főmunkatárs, MTA-ELTE Peptidkémiai Kutatócsoport

Előtanulmányi feltételek: a vegyész MSc. belépési követelményei, alapvető szerves (ELTE kémia BSc. elvégzése esetén: eredményes vizsga szerves kémia, másoknak: ezzel ekvivalens ismeretek)

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Biológiailag aktív peptidek, konjugátumok kémiai karakterizálása (aminosavanalízise, peptidtartalom-, szubsztitúciófok meghatározása). A vegyületek elemanálízise, fluoreszcencia paraméterek meghatározása fluoreszcens származékok esetében. Sejtbejutási vizsgálatok (koncentráció, idő- és hőmérsékletfüggés), citotoxicitás vizsgálatok.

Kötelező irodalom*

Cooper, C: Amino Acid Analysis Protocols, (fejezetek) Humana Press, 2000

Walker, JM: Basic Protein and Peptide Protocols, (fejezetek) Humana Press, 1994

Walker, JM: Protein Protocols, (fejezetek) Humana Press, 2002

Ajánlott irodalom:

Az elemanalítika korszerű módszerei Akadémiai Kiadó, 2006, (szerk. Záray Gyula).

Immunológiai módszerek, Medicina 2007, (szerk: Erdei Anna).

Tantárgy neve: Biológiailag aktív peptidek kémiai és funkcionális jellemzése *in vitro*, laboratóriumi gyakorlat

Kredit: 1

tantárgyfelelős neve/tanszéke: Bősze Szilvia/ tudományos főmunkatárs, MTA-ELTE Peptidkémiai Kutatócsoport

Előtanulmányi feltételek: a vegyész MSc. belépési követelményei, alapvető szerves (ELTE kémia BSc. elvégzése esetén: eredményes vizsga szerves kémia, másoknak: ezzel ekvivalens ismeretek)

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Aminosavanalízis oszlop előtti és utáni származékképzési módszerekkel, peptidtartalom- és szubsztitúciófok meghatározása SYKAM műszeren és RP-HPLC alkalmazásával. A vegyületek elemanalízise VARIO EL III elemanlizátoron, halogéntartalom meghatározása konjugálási reakciók előtt. Sejtbejutási vizsgálatok BD LSR II áramlási citométeren, FACS Diva 5.0 szoftver segítségével. MTT alapú és áramlási citometriás összehasonlító citotoxicitás vizsgálatok.

Kötelező irodalom*

Cooper, C: Amino Acid Analysis Protocols, (fejezetek) Humana Press, 2000
Walker, JM: Basic Protein and Peptide Protocols, (fejezetek) Humana Press, 1994
Walker, JM: Protein Protocols, (fejezetek) Humana Press, 2002

Ajánlott irodalom:

Az elemanalítika korszerű módszerei (szerk. Záray Gyula), Akadémiai Kiadó, 2006
Immunológiai módszerek, Medicina 2007, szerk: Erdei Anna

Tantárgy neve: Biológiai aktív peptidek szintézise

Kredit: 2

tantárgyfelelős neve/tanszéke: Mező Gábor, tudományos tanácsadó, MTA-ELTE

Peptidkémiai Kutatócsoport

Előtanulmányi feltételek: a kémia MSc. belépési követelményei, alap szerves kémia (ELTE kémia BSc. elvégzése esetén: eredményes vizsga szerves kémia, másoknak: ezzel ekvivalens ismeretek)

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

A peptidszintetikus módszerek bemutatása a klasszikus oldat szintézisektől a szilárdfázisú peptidszintéziseken át a modern ligációs eljárásokig. Védőcsoportok alkalmazása és megfelelő védőcsoportkombinációk kialakítása a sikeres szintézisek érdekében. A szintéziskor előforduló mellékreakciók, szintetikus problémák és azok elkerülése. A szintetikus módszerek előnyeinek és hátrányainak összehasonlítása. Szintézisút tervezés.

Kötelező irodalom*:

- Medzihradsky Kálmán: A természetes peptidek szintézise. A kémia újabb eredményei 3 (1970).
- Bajusz Sándor: Peptidszintézis. A kémia újabb eredményei 47 (1980).
- G.A. Grant: Synthetic peptides, a user's guide (Freeman & Co., New York, 1992)

Tantárgy neve: Biomolekuláris kémia II

Kredit: 2

tantárgyfelelős neve/tanszéke: Hollósi Miklós egyetemi tanár, Szerves Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: a vegyész MSc. belépési követelményei, alapvető szerves kémiai és biokémiai ismeretek (ELTE kémia BSc. elvégzése esetén: eredményes vizsga szerves kémiából és biokémiából, másoknak: ezzel ekvivalens ismeretek)

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Fehérjék vizsgálata. Gének feltérképezése. Rekombináns DNS technológia. Lipidek és sejt-membránok. Membráncsatornák és pumpák. Anyagcsere alapelvek. Jelátvitel. A szénhidrátok, zsírok és fehérjék anyagcseréje. Biomolekulák szintézise. Válasz a környezeti hatásokra.

Kötelező irodalom*:

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

Tantárgy neve: Biomolekuláris tömegspektrometria

Kredit: 2

tantárgyfelelős neve/tanszéke:

Schlosser Gitta, ELTE-MTA Peptidkémiai Kutatócsoport, Szerves Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek:

A vegyész M.Sc. képzés belépési követelményei, alapvető szerves kémiai és analitikai kémiai ismeretek (ELTE kémia B.Sc. elvégzése esetén: eredményes vizsga szerves kémia és analitikai kémia tárgyából, másoknak: ezzel ekvivalens ismeretek.)

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

1. A tömegspektrométerek felépítése és működése (ionizációs módszerek, analizátor típusok)
2. Tandem tömegspektrometria (MS/MS), peptidek fragmenációja, peptidszekvenálás
3. Kromatográfiával kapcsolatos tömegspektrometria
4. Peptidek, fehérjék, oligonukleotidok, oligosaccharidok és lipidek szerkezetvizsgálata
5. Fehérjeazonosítás, fehérjék mennyiségi vizsgálata, poszt-transzlációs módosítások meghatározása, proteomika
6. A tömegspektrometria legújabb irányzatai

Kötelező irodalom*:

-

Ajánlott irodalom:

1. Chhabil Dass: **Principles and Practice of Biological Mass Spectrometry** (Wiley)
2. Chava Lifshitz , Julia Laskin: **Principles of Mass Spectrometry Applied to Biomolecules** (Wiley)
3. Mahmoud H. Hamdan, Pier G. Righetti: **Proteomics Today: Protein Assessment and Biomarkers Using Mass Spectrometry, 2D Electrophoresis, and Microarray Technology** (Wiley)

Tantárgy neve: **BioNMR spektroszkópia**

XXXX

Tantárgy heti óraszám: **heti 3 óra előadás, 2 óra gyakorlat, 5 kredit**

kreditértéke: **5**

kötelező előadás bármely BSc-vel érkező hallgató számára

tantárgyfelelős neve: **Perczel András**

tanszéke: **Szerves Kémiai Tanszék**

számonkérés rendje: **kollokvium**

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Az előadás célja a szerves és biomolekulák NMR-spektroszkópiájának elméleti és gyakorlati elsajátítása, a komplex spektrumértékeléshez szükséges alapok megszerzése valamint a szerkezetvizsgálat alapjainak elsajátítása.

A bioNMR spektroszkópia elméleti alapjai (a vektormodell, a szorzatoperátor formalizmus, relaxáció, nukleáris Overhauser effektus, polarizáció transzfer, skaláris és dipólcsatolás, populáció és koherencia, a kémiai eltolódás)

Spektrális jelhozzárendelés és a többdimenziós NMR spektroszkópia (COSY, RELAY, TOCSY, NOESY, ROESY)

Izotópjelölés és „szerkesztett” spektrumok (HSQC, HMBC, TOCSY-HSQC, HNC0, HNCA, stb.)

Az NMR szerkezetmeghatározás alapjai (jelhozzárendelés, kényszerfeltételek gyűjtése, célfüggvény minimalizálás és szerkezetellenőrzés)

Peptidek és fehérjék térszerkezete (15 kDa kisebb, 15-30 kDa és 30 kDa nagyobb rendszerek sajátosságai)

NMR- és röntgenszerkezetek összehasonlítása

Fehérjék feltekeredése (termális letekeredés, hidrogén-deutérium csere, rendezetlen fehérjék)

Enzimek és működésük, ahogyan az NMR látja

Nukleinsavak és szénhidrátok NMR spektroszkópiája

Kötelező irodalom: P.J. Hore Mágneses Magrezonancia (Nemzeti Tankönyvkiadó, 2003)
Az előadás 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)

Tantárgy neve: Bioorganikus kémia

Kredit: 2

tantárgyfelelős neve/tanszéke: Medzihradzky Kálmán, Szerves Kémia

Előtanulmányi feltételek: *a vegyész MSc. belépési követelményei, alapvető szerves és szervetlen kémiai ismeretek (ELTE kémia BSc. elvégzése esetén: eredményes vizsga szerves kémia, szervetlen kémia tárgyából, másoknak: ezzel ekvivalens ismeretek)*

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Farmakokinetika: Farmakonok eloszlása, kötődés makromolekulákhoz, elválasztási módszerek, affinitási kromatográfia.

Metabolizmus: farmakonok jelzése radioizotópokkal, mikroszomális átalakulások, konjugációs reakciók, farmakonok aktiválása, peptidhormonok bioszintézise.

Kemoterápia: baktériumsejtfal felépítése, antibakteriális vegyületek, antibiotikumok, rákkemoterápia.

Farmakodinamika: Receptorok működése, proteolitikus enzimek gátlása, opioid peptidek.

Kötelező irodalom: —

Ajánlott irodalom: W.O.Foye (Ed.): Principles of Medicinal Chemistry, Lea and Fabiger, Philadelphia-London, 1989

Tantárgy neve: Biospektroszkópia gyakorlat

Kredit: 4

tantárgyfelelős neve/tanszéke: Vass Elemér egyetemi docens, Szerves Kémia Tanszék

Előtanulmányi feltételek: a vegyész MSc. belépési követelményei, alapvető szerves kémiai és spektroszkópai ismeretek (ELTE kémia BSc. elvégzése esetén: eredményes vizsga szerves kémia (2) és szerves spektroszkópia tárgyakból, másoknak: ezzel ekvivalens ismeretek)

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

A tárgy a biomolekulák (mint például peptidek, fehérjék, szteroidok, nukleinsavak) szerkezetvizsgálatában alkalmazott legfontosabb spektroszkópai módszerek gyakorlatának elsajátítását, valamint a spektrumok értelmezéséhez, a térszerkezet felderítéséhez szükséges alapvető ismeretek megszerzését célozza meg. A tárgy ultraibolya-látható és infravörös spektroszkópia, bioNMR, biomolekuláris tömegspektrometria, valamint elektronikus és rezgési cirkuláris dikroizmus (CD, VCD) spektroszkópai gyakorlatokat tartalmaz.

Kötelező irodalom:

Műszeres Szerves Analitikai Gyakorlatok, Egyetemi jegyzet, összeállította az ELTE Szerves Kémiai Tanszék munkaközössége, Budapest (1995).

Joseph B. Lambert, Herbert F. Shurvell, David A. Lightner, R. Graham Cooks: Organic Structural Spectroscopy, Prentice Hall, Upper Saddle River, New Jersey, USA (2001)

Ajánlott irodalom:

Hollósi Miklós, Laczkó Ilona, Majer Zsuzsa: A sztereokémia és kiroptikai spektroszkópia alapjai, Nemzeti Tankönyvkiadó, Budapest (2004).

Perczel András, Laczkó Ilona, Hollósi Miklós: Peptidek térszerkezet-vizsgálata. A kémia legújabb eredményei, Akadémiai Kiadó, Budapest (1994).

Gerald D. Fasman (Ed.): Circular Dichroism and Conformational Analysis of Biomolecules, Plenum Press, New York (1996).

Tantárgy neve: Ciklodextrinek kémiája

Kredit: 2

tantárgyfelelős neve/tanszéke: Orgoványi Judit, Szerves Kémia Tanszék

Előtanulmányi feltételek: a vegyész MSc. belépési követelményei, alapvető szerves és analitikai kémiai ismeretek

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Ciklodextrinek előállítása, tulajdonságai, származékai. Az inklúziós komplexek előállítása és szerkezete.

A ciklodextrin téma múltja, jelene és jövője.

Ciklodextrinek ipari alkalmazásának lehetőségei: gyógyszer-, élelmiszeripar.

Ciklodextrinek a környezetvédelemben. Környezetkímélő növényvédelem. Zöldkémiai alkalmazások.

Ciklodextrin származékok szintézise.

Ciklodextrin polimerek és alkalmazásuk.

Ciklodextrinek az analitikában. Ciklodextrinek és komplexeik termoanalitikai vizsgálata.

Ciklodextrinek, mint királis szelektorok alkalmazása a kapilláris elektroforézisben.

Kötelező irodalom*:

Ajánlott irodalom:

J. Szejtli: Cyclodextrins and their inclusion complexes, Akadémiai Kiadó, 1982

Tantárgy neve: Egészségkárosító kémiai hatások és megelőzésük

Kredit: 2

Tantárgyfelelős: Marcsek Zoltán

A tantárgyfelelős tanszéke: Molekuláris és Sejtbiológiai Osztály, Országos Kémiai Biztonsági Intézet

Előtanulmányi feltételek: a vegyész és/vagy biológus MSc. belépési követelményei, alapvető kémiai és/vagy biológiai ismeretek

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

A vegyi anyagok veszélyei, a fenntartható fejlődés, kemizálás, a kémiai biztonság fogalma. Kémiai anyagok bekerülése az élő szervezetbe, hatásuk a szervekre. Szerkezet-hatás összefüggések. Toxikológiai vizsgálatok: elvek, szintek: állatkísérletek – in vitro rendszerek. Akut toxicitás, késői toxikus hatások: daganatkeltő hatás, géntoxikus hatások, immuntoxikus hatások, hatások az endokrin rendszerre, idegrendszerre, ivarszervekre, magzati fejlődésre. Az élő rendszerekre fejlesztett anyagok, biocidok, herbicidek, termésnövelők. A veszélyes anyagok felosztása, mérgezések. A kémiai biztonság hazai (OKBI) és nemzetközi intézményei (EU: REACH, OECD, USA/Japán: EPA) az anyagok gyártásának, kezelésének, felhasználásának kockázatbecslése.

Kötelező irodalom:

Tompa Anna (ed): Kémiai biztonság és toxikológia. Medicina Kiadó, Budapest, 2004.

Ajánlott irodalom:

Kopper László, Marcsek Zoltán, Kovalszky Ilona: Molekuláris medicina. Medicina Kiadó, Budapest, 1997.

Tantárgy neve: Elektromigrációs módszerek

Kredit: 2

tantárgyfelelős neve/tanszéke: Dibó Gábor egyetemi docens, Szerves Kémia Tanszék

Előtanulmányi feltételek: a vegyész MSc. belépési követelményei, alapvető szerves kémiai ismeretek (ELTE kémia BSc. elvégzése esetén: eredményes vizsga szerves kémia, tárgyakból, másoknak: ezzel ekvivalens ismeretek)

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Tiselius-féle kísérlet: zónaelektroforézis. Papír- és vékonyréteg-elektroforézis. Kétdimenziós technikák: peptid térkép-készítés. Az elektroforézis berendezések felépítése és működési elve. Biztonsági rendszabályok. Elektroforézis cellulóz-acetát membránon (CAM). Agaróz gélelektroforézis. Nukleinsavak elválasztása, tisztaságvizsgálata, izolálása. A másolatkészítés (Southern- és Northern-blotting). Peptidek és fehérjék molekulatömegének meghatározása: Ferguson-görbe. Peptidek és fehérjék molekulatömegének meghatározása: Ferguson-görbe. Poliakrilamid-gélelektroforézis (PAGE) elmélete és gyakorlata. Peptidek és fehérjék molekulatömegének meghatározása: Ferguson-görbe. Festési eljárások. A Laemmli és a Weber–Osborn módszer. DNS-szekvenálás: a didezoxi módszer. Radioaktív és fluoreszcens jelölés. Genom projekt. Kétdimenziós gélelektroforézis, másolatkészítés (Western-blotting). Proteoma projekt. Speciális technikák: mikroelektroforézis, preparatív elválasztások, a szabad-áramlásos (free-flow) eljárás. Izoelektromos fókuszálás (IEF), az amfolitok. Polipeptidek izoelektromos pontjának meghatározása. Az izotachoforézis elmélete és gyakorlata. Kapilláris elektroforézis.

Az elektroforézis fiziko-kémiai alapjai: elektroforetikus vándorlás a kapilláris belsejében, elektrooszmózis, diffúzió, Joule-hő. Készüléktípusok. Mintabeviteli technikák. Detektálási módszerek (UV, fluoreszcencia, tömegspektrometria). Az elektrolit megválasztása. A kapilláris szerepe, reverzibilis és irreverzibilis borítás. A kapilláris elektroforézis módoszatai: CZE, CGE, CIEF, CITP, MECC, CEC. Királis elválasztások. A királis szelektorok (ciklodextrinek, királis koronaéterek).

Kötelező irodalom:

A. Gáspár: *Kapilláris zónaelektroforézis*, Egyetemi Kiadó, Debrecen, 2000.

T. Kremmer, K. Torkos, Gy. Szókán: *Elválasztástechnika*, Egyetemi Nyomda, Budapest, 2006.

Ajánlott irodalom:

R. Westmeier: *Electrophoresis in Practice: A Guide to Methods and Applications of DNA and Protein Separations*, Wiley-VCH, 2005.

R. Weinberger: *Practical Capillary Electrophoresis*, Academic Press, 2007.

Tantárgy neve: Elméleti szerves kémia 2

Kredit: 2

tantárgyfelelős neve/tanszéke: Hajós György, MTA Kémiai Kutatóközpont Biomolekuláris Kémiai Intézet

Előtanulmányi feltételek: a vegyész MSc. belépési követelményei, alapvető szerves kémiai ismeretek (ELTE kémia BSc. elvégzése esetén: eredményes vizsga szerves kémiából, másoknak: ezzel ekvivalens ismeretek)

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

A frontális molekulapálya-elmélet kvalitatív felhasználása kémiai reakciók értelmezésére, az aromás jelleg, periciklusos reakciók, a Hammond-féle posztulátum jelentősége aromás elektrofil szubsztitúciók végbemeneténél, törvényszerűségek az aromás és heteroaromás nukleofil szubsztitúciók sorában, a kemény-lágy sav-bázis elv, gyökös reakciók és értelmezésük, gyökös aromás szubsztitúció, a Hammett-összefüggés, perturbációs hatások, fotokémiai reakciók, karbénok és nitrénok, karbokationos átrendeződések. Kémiai átalakulások értelmezése a reakciómechanizmus alapján.

Kötelező irodalom:

Az órák megtartása után átadott ábragyűjtemény

Ajánlott irodalom:

T. H. Lowry and K. S. Richardson: Mechanism and Theory in Organic Chemistry, Harper and Row Publ., New York, 1987.

Tantárgy neve: **Fehérjék és peptidek térszerkezetvizsgálata spektroszkópia módszerekkel**

Tantárgy heti óraszám: **heti 2 óra előadás, 2 kredit**

kreditértéke: **2**

javasolt előadás bármely BSc-vel érkező hallgató számára

tantárgyfelelős neve: **Perczel András**

tanszéke: **Szerves Kémiai Tanszék**

számonkérés rendje: **kollokvium**

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Az előadás célja a szerves és biomolekulák konformációanalízisének elméleti és gyakorlati megalapozása, a szerkezetkutatás elsajátításához szükséges spektrumértékelések és molekulamodellezések 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.

Kötelező irodalom: A. Perczel, I. Laczkó és M. Hollósi Peptidek térszerkezetvizsgálata A kémia újabb eredményei, 1994)

Az előadás 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)

Tantárgy neve: A fehérjekrisztallográfia módszerei

Tantárgy heti óraszám: 2 óra

kreditértéke: 2

tantárgyfelelős neve: Harmat Veronika

tanszéke: Szerves Kémiai Tsz.

előfeltétel: nincs

számonkérés rendje: kollokvium

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

A kurzus célkitűzése gyakorlati személetű bevezetést nyújtani a makromolekulák röntgendiffrakciós szerkezet-meghatározásának módszereibe.

1. Elméleti alapok, a módszer lehetőségei és korlátai
2. Az elektronsűrűségi függvény és a szerkezeti tényező viszonya
A röntgensugár kristályon való szóródása, a krisztallográfiai fázisprobléma
Kristályszimmetria, a diffrakciós kép szimmetriája
3. Kristályosítási és adatgyűjtési módszerek
4. A fázisprobléma megoldása:
A Patterson függvény
Molekuláris helyettesítés
Izomorf helyettesítés
Az anomális szórás felhasználása
5. Az elektronsűrűségi térképtől a molekula térszerkezetéig: modellépítés,
szerkezetfinomítás
A modell hiba
6. Hibaforrások a szerkezetmegoldás során, a szerkezet validálása
7. Új irányzatok és kihívások a fehérjekrisztallográfiában
Szerkezeti genomika
Nagy molekulakomplexek vizsgálata
8. Alkalmazások a gyógyszertervezésben
Szerkezet alapú és fragmens alapú gyógyszertervezés
9. Membránfehérjék szerkezetvizsgálata
10. Molekuláris mozi: időfelbontásos krisztallográfia

Ajánlott irodalom:

Blow, David „Outline of Crystallography for Biologists”, Oxford University Press
2002

Drenth, Jan „Principles of Protein X-Ray Crystallography” Springer 1999

Tantárgy neve: Fizikai szerves kémia I.

Kredit: 2

tantárgyfelelős neve/tanszéke: Vass Elemér egyetemi docens, Szerves Kémia Tanszék

Előtanulmányi feltételek: a vegyész MSc. belépési követelményei, alapvető szerves- és fizikai kémiai ismeretek (ELTE kémia BSc. elvégzése esetén: eredményes vizsga szerves kémia (2) és fizikai kémia (2) tárgyakból, másoknak: ezzel ekvivalens ismeretek)

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

A tárgy bevezetést nyújt a szerves reakciók mechanizmusának vizsgálatához szükséges alapvető kémiai és fizikai-kémiai módszerekbe és a következő témaköröket foglalja magában: A szerves reakciók mechanizmusának nemkinetikai vizsgálati módszerei. A kémiai reakciók energiaviszonyai. Elemi reakciók kinetikája. Összetett reakciók kinetikája. A kémiai reakciók átmeneti állapota. Szerkezet és reaktivitás közti összefüggések.

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).

Tantárgy neve: Fizikai szerves kémia II.

Kredit: 2

tantárgyfelelős neve/tanszéke: Vass Elemér egyetemi docens, Szerves Kémia Tanszék

Előtanulmányi feltételek: az ELTE vegyész MSc. keretében a Fizikai szerves kémia I tárgy előzetes teljesítése

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

A tárgy a Fizikai szerves kémia I speciális kollégium ismereteire építve a szerves reakciók mechanizmusának vizsgálatában alkalmazott speciális fizikai-kémiai elméletek és reakciókinetikai módszerek ismertetését tűzi ki célul, és a következő fejezeteket tárgyalja: Izotópeffektus. Közeghatás. Savak, bázisok, elektrofilek, nukleofilek. Homogén katalízis.

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).

Tantárgy neve: Folyadékkristályok szintézise és vizsgálata

Kredit: 2

tantárgyfelelős neve/tanszéke: Jalsovszky István, Szerves Kémiai Tanszék; Előadó: Fodorné Csorba Katalin tudományos főmunkatárs, MTA Szilárdtestfizikai és Optikai Kutatóintézet

Előtanulmányi feltételek: a vegyész MSc. belépési követelményei, alapvető szerves és szervetlen kémiai ismeretek (ELTE kémia BSc. elvégzése esetén: eredményes vizsga szerves kémia, fizikai kémia tárgyakból, másoknak: ezzel ekvivalens ismeretek)

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

A folyadékkristályok kémiai felépítése, mezofázisaik meghatározása polarizációs optikai mikroszkóppal és röntgenkristalligráfiával. Deutériummal jelzett folyadékkristályok előállítás és a molekulák orientációs rendjének tanulmányozása ^2H NMR spektroszkópiával. Aromás, heteroaromás, aliciklusos vegyületek szerkezeti jellemzői és szintézisük. Kémiai szerkezet-mezofázis tulajdonságok megjelenésének elemzése. Ferroelektromos folyadékkristályok tervezése. Lioróp rendszerek. Polimer folyadékkristályok. Lineáris és hajlott törzsű, azaz banán alakú molekulák tulajdonságainak összehasonlítása, új mezofázisok. Elektro-optikai tulajdonságok elemzése, a kijelző technikában felhasznált anyagok és módszerek ismertetése. Információ tárolás kémiai úton. Folyadékkristályok felhasználása a gyakorlatban.

Ajánlott irodalom:

Bata Lajos: Folyadékkristályok Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1986.

B. Bahadur: Liquid Crystals, Application and uses Vol, I-III, World Scientific, Singapore, 1991.

P. Collings, M. Hird: Introduction to Liquid Crystals, Taylor and Frances, 1998

Tantárgy neve: Gyógyszerek szerkezete és hatása I

Kreditértéke: 2

tantárgyfelelős neve: Hudecz Ferenc, egyetemi tanár, Szerves Kémia Tanszék

Előtanulmányi feltételek: kémia BSc (egyéb: ezzel egyenértékű szerves kémiai ismeretek)

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

A gyógyszer minőség-, hatékonyság- és biztonságvizsgálatok. Toxikológia, genotoxicológia, reprodukció toxikológia, farmakokinetika, metabolizmus-vizsgálatok. Szerkezet-hatás összefüggések vizsgálata: kísérlettervezés, hatástani csoportosítás. Stabilitásvizsgálatok. Hatásmechanizmus vizsgálatok (pl. receptor kötődés, enzimgátlás). Gyógyszerek és más xenobiotikumok kölcsönhatása az emberi szervezettel. A farmakokinetika fő folyamatai, a biotranszformáció két fázisa. A gyógyszerhatás célmolekulái.

Kötelező irodalom:

[R. Ng](#): Drugs-From Discovery to Approval, Wiley, 2004

[R. B. Silverman](#): The Organic Chemistry of Drug Design and Drug Action, Academic Press, 1992

Ajánlott irodalom:

P. Krosgaard-Larsen, T. Liljefors and U. Madsen: Textbook of Drug Design and Discovery 3rd Edition, Taylor and Frances, 2002

Chi-Jen Lee *et al.*: Development and Evaluation of Drugs: From Laboratory through Licensure to Market, 2nd Edition, 2003

[G. Thomas](#): Medicinal Chemistry: An Introduction, Wiley, 2001

[J. Cannon](#): Pharmacology for Chemists (ACS Professional Reference Book), Oxford University Press, 1999

Tantárgy neve: Gyógyszerek szerkezete és hatása II

Kreditértéke: 2

tantárgyfelelős neve: Hudecz Ferenc, egyetemi tanár, Szerves Kémia Tanszék

Előtanulmányi feltételek: kémia BSc (egyéb: ezzel egyenértékű szerves kémiai ismeretek)

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Az immunrendszer sejtjei és molekulái. A B és T sejt epitópok azonosítása. Mesterséges vakcinák. Karcinogenezis, epidemiológia, környezeti hatások. Korai diagnózis, tumormarkerek. Sugárterápia. Kemoterápia. Kombinált terápia. Hatásmechanizmus, főbb támadáspontok. Célbajuttatás. Biológiai válaszmódosítók, endogén és szintetikus immunmodulátorok. Immunterápia, immunszuppresszió.

A gyógyszerek csoportosítása, a hatóanyagok elnevezése. A hatóanyagok útja a szervezetben, az ADME tulajdonságok. A hatóanyagok célpontjai, a gyógyszerhatás molekuláris mechanizmusa. Enzimeken ható gyógyszerek. Receptorokon ható gyógyszerek. Kvantitatív szerkezet-hatás összefüggések.

Kötelező irodalom:

[R. Ng](#): Drugs-From Discovery to Approval, Wiley, 2004

[R. B. Silverman](#): The Organic Chemistry of Drug Design and Drug Action, Academic Press, 1992

Ajánlott irodalom:

P. Krogsgaard-Larsen, T. Liljefors and U. Madsen: Textbook of Drug Design and Discovery 3rd Edition, Taylor and Frances, 2002

Chi-Jen Lee *et al.*: Development and Evaluation of Drugs: From Laboratory through Licensure to Market, 2nd Edition, 2003

[G. Thomas](#): Medicinal Chemistry: An Introduction, Wiley, 2001

[J. Cannon](#): Pharmacology for Chemists (ACS Professional Reference Book), Oxford University Press, 1999

Tantárgy neve: Gyógyszeripari kutatás és fejlesztés

Kredit: 2

tantárgyfelelős neve/tanszéke: Majer Zsuzsa (Deckerné), Szerves Kémia Tanszék

Előtanulmányi feltételek: kémia BSc (egyéb: ezzel egyenértékű szerves kémiai ismeretek)

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Szellemi tulajdonvédelmi alapok:

- A szellemi tulajdonvédelem és az iparjogvédelem alapjai, különféle oltalmi formák.
- A hazai szabadalmi rendszer és eljárás, nemzetközi szabadalmi rendszerek.
- Szabadalmak a kémiában és a gyógyszeriparban.
- Iparjogvédelmi információs rendszer, adatbázisok.

Originális gyógyszerkutatás:

- Az originális gyógyszerkutatás és fejlesztés kockázatai és költségei
- A gyógyszerkutatási célpontok, receptorok
- Szűrővizsgálati rendszerek
- A fejlesztési jelölt tulajdonságai

Kötelező irodalom*:

Ajánlott irodalom:

Lontai Endre: Szellemi alkotások joga (Eötvös József kiadó, Bp. 1998) Szellemi tulajdonvédelemről mindenkinek (MIE 2002) Önök kérdezték - iparjogvédelem, szerzői jog - mi válaszolunk (NSZH 2006) Útmutató az iparjogvédelmi eljárásokhoz (MSZH 2006) A szabadalmi bejelentés (MSZH 2004)
Drug Discovery Handbook (ed. S.C.Gad, John Wiley & Sons, 2005)

Name of the course: **Gyógyszerkutatás**

Tantárgy heti óraszám: 2+0

Kreditérték: 2

Coordinator: Hudecz Ferenc

Department: Szerves Kémia Tanszék

számonkérés rendje: vizsga

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Szintézisstratégiák a gyógyszerkutatásban (vegyülettárak, szemiszintézisek, enzimátikus szintézisek). Szerkezet-hatás összefüggések vizsgálata: kísérlettervezés, hatástani csoportosítás. Kémiai informatika molekulatervezés, molekulamodellés, adatbázisok. Stabilitásvizsgálatok. Random és high-throughput screening technikák. Hatásmechanizmus vizsgálatok (pl. receptor kötődés, enzimgátlás). Toxicitás, biodisztribúció és metabolizmus kutatás. Drug-targeting és drug-delivery rendszerek. Gyógyszerformulázás. A klinikai kipróbálás fázisai. Törzskönyvezés. Szabadalmi aspektusok. A gyógyszeripar kialakulása, jellemzése. A hazai gyógyszeripar története és mai helyzete. Sikeres hazai kutatások.

Kötelező irodalom:

R. Ng: *Drugs-From Discovery to Approval*, Wiley, 2004

R. B. Silverman: *The Organic Chemistry of Drug Design and Drug Action*, Academic Press, 1992

Ajánlott irodalom:

P. Krogsgaard-Larsen, T. Liljefors and U. Madsen: *Textbook of Drug Design and Discovery* 3rd Edition, Taylor and Frances, 2002

Chi-Jen Lee *et al.*: *Development and Evaluation of Drugs: From Laboratory through Licensure to Market*, 2nd Edition, 2003

G. Thomas: *Medicinal Chemistry: An Introduction*, Wiley, 2001

J. Cannon: *Pharmacology for Chemists (ACS Professional Reference Book)*, Oxford University Press, 1999

Tantárgy neve: Gyűrűzárási reakciók**Kredit: 2****tantárgyfelelős neve/tanszéke:** Hajós György, MTA Kémiai Kutatóközpont Biomolekuláris Kémiai Intézet**Előtanulmányi feltételek:** a vegyész MSc. belépési követelményei, alapvető szerves kémiai ismeretek (ELTE kémia BSc. elvégzése esetén: eredményes vizsga szerves kémiából, másoknak: ezzel ekvivalens ismeretek)**Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:**

A periciklusos reakciók osztályozása és értelmezése kvalitatív molekulapálya-elmélet segítségével. A 2-, 4- és 6-elektronos elektrociklizációs reakciók, a szimmetria megmaradásának tétele. A 2+2 cikloaddíciók megvalósulásának lehetősége. Karbének reakciója olefinekkel. Gyökös 2+2 cikloaddíciók. Diels-Alder regioszelektivitása, 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

Tantárgy neve: Heteroaromás vegyületek kémiája

Kredit: 2

tantárgyfelelős neve/tanszéke: Hajós György, MTA Kémiai Kutatóközpont Biomolekuláris Kémiai Intézet

Előtanulmányi feltételek: a vegyész MSc. belépési követelményei, alapvető szerves kémiai ismeretek (ELTE kémia BSc. elvégzése esetén: eredményes vizsga szerves kémiából, másoknak: ezzel ekvivalens ismeretek)

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

A heteroaromaticitás fogalma, elektronhiányos és elektrontöbblettel rendelkező gyűrűrendszerek összehasonlítása. Pirrolok, diazolo, valamint oxigént és ként tartalmazó azolo, és benzolójaiak szintézise. Az öttagú heteroaromás rendszerek reakciókészsége. Piridin és benzolójaiak szintézis-lehetőségei, különös tekintettel a modern módszerekre. Diazinok és benzolójaiak előállítása. A hattagú heteroaromás rendszerek reakciókészsége. Hídfo-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.

Tantárgy neve: Hőbomlási reakciók alkalmazása hulladékok hasznosítására

Kredit: 2

tantárgyfelelős neve/tanszéke: Blazsó Marianne/ Szerves Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: a vegyész MSc. belépési követelményei, alapvető polimerkémiai ismeretek

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Hő hatására bekövetkező kémiai reakciók szerves anyagokban. Szerves makromolekulák hőbomlása. Szerves makromolekuláris anyagok az ipari, mezőgazdasági és kommunális hulladékokban. Polimerek hőbomlási folyamatai (poliolefinok, vinil polimerek, PVC, gumik, poliéterek, poliészterek, poliamidok, poliuretánok, fenolgyanta, epoxi gyanták, szilíciumorganikus polimerek). Fa, mezőgazdasági melléktermékek (biomassza), cellulóz és lignin hőbomlása. Műanyag és biomassza hulladékok hőbomlástermékeinek katalitikus átalakítása. Ásványi szén- és kőolaj feldolgozóipari melléktermékek hőbomlása és pirolízisoldajának katalitikus átalakítása.

Kötelező irodalom*:

Ajánlott irodalom:

Feedstock recycling and pyrolysis of waste plastics, (Scheirs, Kaminsky Eds., Wiley, 2006)

Tantárgy neve: Kémiai menedzser

Kredit: 2

tantárgyfelelős neve/tanszéke: Horváth István Tamás egyetemi tanár, Szerves Kémia

Tanszék

Előtanulmányi feltételek: a vegyész MSc. belépési követelményei

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Az általános kutatási és fejlesztési vezetési módszerek bemutatása után a kémiai tudományokat alkalmazó K+F+I tevékenységek vezetéséhez szükséges speciális módszereket ismerteti. Az anyag elsajátítását kiválasztott publikációk, video filmek és csoportos gyakorlatok fogják segíteni.

Kutatási stratégia kialakítását segítő módszerek, Kutatási és fejlesztési módszerek, Önelemzés és versenyfelek értékelése, Stratégiailag fontos együttműködések kiválasztása, Versenyképes technológiához vezető stratégiai fejlesztés, Többszemélyes K+F csoportok vezetése, Szerkezeti egységek felépítésének hatása a K+F vezetésre, Szabadalmi védelem és ennek hatása a K+F vezetésre, Technológia átadás/átvétel, A környezeti faktor a kémiai K+F vezetésben, Tudományos felfedezések hatása a kémiai K+F vezetésben

Kötelező irodalom*:

Chikán Attila: Vállalatgazdaságtan, AULA Kiadó, Budapest, 2000

Internet: www.cordis.lu – Research & Development

Ajánlott irodalom:

National Research Council: Linking Science and Technology to Society's Environmental Goals, National Academic Press, Washington D.C., 1996

Tantárgy neve: Kémiai biológia

Kredit: 2

tantárgyfelelős neve/tanszéke: Dibó Gábor egyetemi docens, Szerves Kémia Tanszék

Előtanulmányi feltételek: a vegyész MSc. belépési követelményei, alapvető szerves kémiai ismeretek (ELTE kémia BSc. elvégzése esetén: eredményes vizsga szerves kémia, tárgyakból, másoknak: ezzel ekvivalens ismeretek)

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Metabolikus folyamatok. A metaboloma kutatási módszerei. Biológiai rendszerekben található szerves kismolekulák. Kismolekulás hatóanyagok tervezése, szintézise. Diverzitásra illetve célvegyületre irányuló szintézisstratégiák. Mikrohullámmal kiváltott szerves szintézisek. Molekulakomplexek előállítása. Az egyenes irányú (forward) kémiai genomika. A fordított irányú (reverse) kémiai genomika. Kémiai toxikogenomika adatbázisai. Kémiai proteomika affinitás vizsgálattal. Kémiaileg jelölt illetve fókuszált molekulatárak generálása. Privilegizált vázszerkezetek megválasztása és alkalmazása a gyógyszerkutatásban. Nagy-áteresztőképeségű biológiai tesztelési stratégiák. Robotrendszerek. Szilárdfázisú mikrotárgylemezek alkalmazása a biológiai hatásvizsgálatokhoz. Kémiai diverzitás. A kémiai és biológiai tér. Virtuális tesztelés alkalmazása a gyógyszertervezésben. Az ADMET paraméterek meghatározása. A rendszer biológia kémiai módszerei.

Kötelező irodalom:

C.M.Dobson, J.A.Gerrard, A.J.Pratt: *Foundations of Chemical Biology*, Oxford University Press, 2001.

S.L.Schreiber, T.Kapoor, G.Wess: *Chemical Biology: From Small Molecules to Systems Biology and Drug Design*, Wiley-VCH, 2007.

Ajánlott irodalom:

Current issues of *Nature – Chemical Biology*

Tantárgy neve: **Kémiai biztonságtechnika**

Tantárgy heti óraszám: 2 (1 óra előadás + 1 óra laboratóriumi gyakorlat)
kreditértéke: 2

tantárgyfelelős neve: Jalsovszky István

tanszéke: Szerves Kémiai Tanszék

számonkérés rendje: évközi zárthelyi dolgozatok és kollokvium

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

EU komform biztonságtechnikai alapismeretek, az EU előírásoknak megfelelő hazai törvények (munkavédelmi-, kémiai biztonságról és környezetvédelemről szóló törvények ill. jogszabályok), baleset-/katasztrófaelhárítási alapelvek, tűz- és robbanásvédelem. A tűz- és munkavédelem helyi szabályozása (ELTE KTCS tűzvédelmi szabályzata, a tűzriadó terve, a tűzoltás alapelvei és eszközrendszere). Nyomás alatti berendezések biztonságtechnikája, toxikológiai alapismeretek, üzemegészségügy, munkahelyi levegőtisztaságvédelem. Veszélyes anyagok kezelésének, raktározásának, szállításának biztonsági előírásai (EU, USA). Villamosság biztonságtechnikája, érintésvédelem. Elsősegélynyújtás különös tekintettel a vegyipari sajátosságokra, személyi védőfelszerelések. Munkalélektan, ergonómia. A munkabiztonságra törekvő szemlélet és magatartás kialakítását a felsorolt témakörökhöz kapcsolódó szituációs gyakorlatok, a veszélyes anyagok tulajdonságainak, ill. ezen anyagok által okozott baleseti helyzetek és elhárításuk laboratóriumi demonstrációja, a megfelelő eszközök és személyi védőfelszerelések alkalmazásának elsajátítása segíti elő.

Kötelező irodalom :

kvvm.hu/ jogszabályok, az ELTE TTK Munkavédelmi szabályzata, Tűzvédelmi szabályzata
(vonatkozó internet honlapok)

Ajánlott irodalom:

Kiss Dénes: Munkavédelem (BME Vegyészmérnöki Kar, Tankönyvkiadó Budapest)

Bükkösi-Frendl-Perjési: Vegyipari Biztonságtechnikai Kézikönyv (MKE)

OMKTI kiadványok, Országos Munkavédelmi Képző- és Továbbképző Központ
biztonságtechnikai könyvsorozata, Budapest

G. Hommel: Veszélyes anyagok, Műszaki Könyvkiadó, Budapest

Tantárgy neve: Kémiai informatika a gyógyszerkutatásban (azonos lett: Molekuláris informatika előadás)

Kredit: 2

tantárgyfelelős neve/tanszéke: Farkas Ödön egyetemi docens, Szerves Kémia Tanszék

Előtanulmányi feltételek: a vegyész MSc. belépési követelményei, alapvető általános, szerves és biokémiai ismeretek és informatikai alapismeretek.

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

A molekuláris szemlélet. Molekuláris rendszerek és tulajdonságaik ábrázolása, modellezése. Hagyományos és informatikai nevezéktan. Kémiai adatbázisok és kezelésük. Molekuláris leírók, ujjenyomatok. Makroszkópikus és molekuláris tulajdonságok becslése és számítása. Szerkezet-hatás összefüggés alapjai és különböző szintű alkalmazásai a gyógyszerkutatásban. Modellek építése érvényességük vizsgálata. Farmakofórok és alkalmazásuk. Nagyteljesítményű osztályozó (high-throughput screening) és kombinatorikus kémiai eljárások informatikája. Számítógépes gyógyszertervezés.

Kötelező irodalom: -

Kémiai informatika a gyógyszerkutatásban (oktatási segédanyag, ELTE Szerves Kémiai Tanszék, előkészületben)

Ajánlott irodalom:

Arup K. Ghose, Vellarkad N. Viswanadhan: Combinatorial Library Design and Evaluation: Principles, Software Tools, and Applications in Drug Discovery (ISBN 0824704878), 2001

Gasteiger, Johann / Engel, Thomas (Szerk.): Chemoinformatics. Wiley-VCH, Weinheim, 2003

Példák, bemutatók és programok a hálózatról: <http://www.chemaxon.com>

Tantárgy neve: Kombinatorikus kémia

Kredit: 2

tantárgyfelelős neve/tanszéke: Dibó Gábor egyetemi docens, Szerves Kémia Tanszék

Előtanulmányi feltételek: a vegyész MSc. belépési követelményei, alapvető szerves kémiai ismeretek (ELTE kémia BSc. elvégzése esetén: eredményes vizsga szerves kémia, tárgyakból, másoknak: ezzel ekvivalens ismeretek)

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

A kombinatorikus szintézis stratégiák (párhuzamos vagy osztásos-keveréses). Egy gyöngy - egy peptid. Dekonvolúciós módszerek. Nagyhatékonyságú szintézisek milligrammos méretben. Szintézisek membrán felületen. Polimer hordozók és kapcsoló szerek szilárdfázisú szintézisekhez. Diverzitásra illetve célvegyületre irányított szintézismódszerek. A kombinatorikus kémia analitikai módszerei. Többkomponensű reakciók a kombinatorikus kémiában. Többlépéses folyadékfázisú szintézisek. Kombinatorikus fluorkémia. Automata kombinatorikus szintetizátorok. Új katalizátorok felfedezése kombinatorikus kémiai módszerekkel. A nagyhatékonyságú biológiai tesztelés módszerei. Kombinatorikus kémia a gyógyszerfelfedezésben. A kémiai biológia alapjai.

Kötelező irodalom*:

Fenniri H.: *Combinatorial Chemistry — A Practical Approach*, Oxford University Press, 2000

Ajánlott irodalom: Furka Á.: A kombinatorikus kémia *Természet Világa* 131, 265-269 (2000).

Tantárgy neve: Kvantumkémiai molekulamodellés a gyakorlatban.

Kredit: 1+1

tantárgyfelelős neve/tanszéke: Farkas Ödön egyetemi docens, Szerves Kémia Tanszék

Előtanulmányi feltételek: a vegyész MSc. belépési követelményei, alapvető elméleti kémiai és informatikai ismeretek.

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Kvantumkémiai számítások elvégzésével megoldható problémák és a kapott eredmények várható pontossága. Extrapolációs és többszintű kvantumkémiai módszerekkel (G2, G3, ONIOM, stb.), oldószermodellek és periodikus peremfeltételek. A számítások elvégzésekor gyakran előforduló nehézségek, a számítási feladatok megterveze és elvégzése. A geometria-optimalás és trajektóriaszámítások eszköztára. Potenciális-energia felületek topológiai tulajdonságai. A Gaussian és a GaussView programok használata.

Kötelező irodalom: Órai jegyzet

Ajánlott irodalom:

Tantárgy neve: Makromolekuláris kémiai folyamatok alapjai

Kredit: 3

tantárgyfelelős neve/tanszéke: Iván Béla egyetemi magántanár, MTA KKI

Előtanulmányi feltételek: a vegyész MSc. belépési követelményei, alapvető általános, szerves és kémiai technológiai ismeretek (ELTE kémia BSc. elvégzése esetén: eredményes vizsga szerves kémia, kémiai technológia tárgyakból, másoknak: ezzel ekvivalens ismeretek)

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Polimer kémiai alapfogalmak, láncpolimerizáció és lépcsős polimerizációs folyamatok alapjai, kopolimerizáció, poliaddíciós folyamatok (gyökös, anionos, kationos, csoporttranszfer, koordinatív, metatézis és gyűrűfelnylásos polimerizációk), lépcsős polimerizációs folyamatok (polikondenzáció és kondenzáció nélküli polireakciók), alkalmazások, környezeti hatások..

Kötelező irodalom:

Farkas Ferenc: Műanyagok és a környezet, Akadémiai Kiadó, Budapest, 2000

Ajánlott irodalom:

G. Odian: Principles of Polymerization, Wiley, New York, 2004

Tantárgy neve: MOLECULAR ENGINEERING OF MACROMOLECULES

Kredit: 2

tantárgyfelelős neve/tanszéke: Iván Béla egyetemi magántanár, Szerves Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: a vegyész MSc. belépési követelményei, alapvető általános, szerves és kémiai technológiai ismeretek (ELTE kémia BSc. elvégzése esetén: eredményes vizsga szerves kémia, kémiai technológia tárgyakból, másoknak: ezzel ekvivalens ismeretek)

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Ennek az angol nyelvű kurzusnak kettős célja van: (1) a modern polimer kémiai ismeretek alapjainak és (2) és az ennek megfelelő kémiai, különösen pedig a polimer kémiai angol szaknyelv elsajátítása. A tárgy a láncpolimerizáció és a lépcsős polimerizáció folyamatát és mechanizmusát, valamint az ideális élő és a kváziélő polimerizáció alapjait és ezek szintetikus alkalmazásait tárgyalja.

Kötelező irodalom:

Kiadott segédanyag.

Ajánlott irodalom:

J. P. Kennedy, B. Iván: Designed Polymers by Carbocationic Macromolecular Engineering: Theory and Practice, Hanser Publishers, Munich, New York, 1992

G. Odian: Principles of Polymerization, Wiley, New York, 2004

Tantárgy neve: Molekuláris informatika

Kredit: 2+2

tantárgyfelelős neve/tanszéke: Farkas Ödön egyetemi docens, Szerves Kémia Tanszék

oktatók: Farkas Ödön és Gáspári Zoltán

Előtanulmányi feltételek: a vegyész MSc. belépési követelményei, alapvető általános és szerves kémiai ismeretek és informatikai alapismeretek.

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

A molekuláris szemlélet és molekulamodellezés alapjai. A szerkezet kódolásának hagyományos (nómenklatúra) és „informatikabarát” módjai. Kémiai szerkezet, tulajdonság, spektroszkópia és reakció adatbázisok és kezelésük. Molekuláris leírók (descriptors, fingerprints). Makroszkópikus és molekuláris tulajdonságok becslése és számítása. Szerkezet-hatás összefüggés alapjai és különböző szintű alkalmazásai a gyógyszerkutatásban. Farmakofórok keresése és alkalmazása. Nagyteljesítményű osztályozó (high-throughput screening) és kombinatorikus kémiai eljárások informatikája. Reakciótervezés.

Kötelező irodalom: -

Ajánlott irodalom:

Gasteiger, Johann / Engel, Thomas (Szerk.): Chemoinformatics. Wiley-VCH, Weinheim, 2003

Példák, bemutatók és programok a hálózatról: <http://www.chemaxon.com>

Tantárgy neve: **NMR pulzusok a szerkezetkutatásban****Xxxx**Tantárgy heti óraszám: **heti 2 óra előadás, 2 kredit**kreditértéke: **2**

javasolt előadás bármely BSc-vel érkező hallgató számára

tantárgyfelelős neve: **Perczel András**tanszéke: **Szerves Kémiai Tanszék**számonkérés rendje: **kollokvium**

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Napjainkra a 12-16 T mágneses térerejű készülékek megteremtették a lehetőséget 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.

Kötelező irodalom: P.J. Hore Mágneses Magrezonancia (Nemzeti Tankönyvkiadó, 2003)
Az előadás jegyzeteAjánlott irodalom: J.N.S.Evens Biomolecular NMR Spectroscopy (Oxford Univ. Press.
1995)A.K.Downing Protein NMR techniques Second Edition (Humana Press
2004)

Tantárgy neve: NMR spektroszkópiai alkalmazások

Kredit: 2

tantárgyfelelős neve/tanszéke: Bodor Andrea, Kémiai Intézet

Előtanulmányi feltételek: alap fizikai kémia

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Az előadás célja megismerkedni és elsajátítani az NMR spektroszkópia alapjait, az NMR spektrumból nyerhető információkat. A hallgatónak az ismeretanyag elsajátítása után el kell tudnia dönteni - elsősorban kismolekulák vizsgálata esetén - milyen mérést kell elvégezni adott szerkezeti, dinamikai kérdések megválaszolásához, azokat milyen módon kell kiértékelni és értelmezni. Elméleti ismeretek mellett számos gyakorlati példa kerül bemutatásra, mind olyanok, amelyeket az ELTE NMR spektroszkópiai laboratóriumában el lehet végezni.

Kötelező irodalom:

1. P. J. Hore: Mágneses magrezonancia, Nemzeti Tankönyvkiadó, Budapest, 2004.
2. P.W. Atkins: Fizikai Kémia, Nemzeti Tankönyvkiadó, Budapest, 2001.

Ajánlott irodalom:

1. M. H. Levitt: Spin Dynamics, John Wiley & Sons, England, 2001.
2. A. E. Derome: Modern NMR Techniques for Chemistry Research, Pergamon Press, England, 1987.

Tantárgy neve: Polimerek tervezett szintézise

Kredit: 2

tantárgyfelelős neve/tanszéke: Iván Béla egyetemi magántanár, MTA KKI

Előtanulmányi feltételek: a vegyész MSc. belépési követelményei, alapvető általános, szerves és kémiai technológiai ismeretek (ELTE kémia BSc. elvégzése esetén: eredményes vizsga szerves kémia, kémiai technológia tárgyakból, másoknak: ezzel ekvivalens ismeretek)

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Polimer kémiai alapfogalmak, az ideális élő és a kváziélő polimerizáció alapjai, ezek alkalmazása polimerek szintézisében, különböző topológiájú (lineáris, ojtott, csillag, hiperelágazásos, dendritikus, térhálós) polimerek szerkezete, ezek előállítási módszerei, legfőbb tulajdonságaik és alkalmazásaik.

Kötelező irodalom:

Kiadott segédanyag.

Ajánlott irodalom:

J. P. Kennedy, B. Iván: Designed Polymers by Carbocationic Macromolecular Engineering: Theory and Practice, Hanser Publishers, Munich, New York, 1992

Tantárgy neve: Polimerkémiai laboratóriumi gyakorlat

Kredit: 4

tantárgyfelelős neve/tanszéke: Iván Béla egyetemi magántanár, MTA KKI

Előtanulmányi feltételek: a vegyész MSc. belépési követelményei, alapvető általános, szerves és kémiai technológiai ismeretek (ELTE kémia BSc. elvégzése esetén: eredményes vizsga szerves kémia, kémiai technológia tárgyakból, másoknak: ezzel ekvivalens ismeretek)

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Polimerizációs kísérletek kivitelezése, a kísérleti technikák elsajátítása, a polimerizációs kinetika vizsgálata, a polimerek tisztítási módszerei, analízisük alapjai

Kötelező irodalom:

Kiadott segédanyag.

Ajánlott irodalom:

Tantárgy neve: Röntgendiffrakció

Tantárgy heti óraszám: 2 óra
 kreditértéke: 2

tantárgyfelelős neve/tanszéke: Harmat Veronika / Szerves Kémiai Tsz.
 előadó: Simon Kálmán, Harmat Veronika
 előfeltétel: nincs
 számonkérés rendje: kollokvium

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

A kismolekulák és fehérjék röntgenkristallográfiás szerkezetvizsgálatában használatos kísérleti és számítási módszerek alapjait tárgyaljuk.

1. A diffrakciós jelenség
2. Szerkezeti tényező - Fourier szintézis
3. Kristályszimmetria - a diffrakciós kép szimmetriája
4. Direkt módszer fázis-meghatározásra
5. Legkisebb négyzetes szerkezetfinomítás
6. Kristályosítás, adatgyűjtés
7. A fázisprobléma megoldása makromolekulák esetén
8. Sűrűségmódosító módszerek, modellépítés
9. Makromolekulák finomítása: maximum valószínűségi és molekuladinamikai módszerek
10. Kristallográfiai adatbankok.

Ajánlott irodalom:

C. Giacovazzo, H.L. Monaco, G. Artioli, D. Viterbo, G. Ferraris, G. Gilli, G. Zanotti, M.

Catti:
 „Fundamentals of Crystallography”, IUCr/Oxford University Press, 2002.

JP. Glusker, M. Lewis, M. Rossi:
 „Crystal Structure Analysis for Chemists and Biologists”, Wiley, 1994

Tantárgy neve: Szerkezeti bioinformatika

Kredit: 2

Tantárgyfelelős: Gáspári Zoltán

A tantárgyfelelős tanszéke: Szerves Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: Biokémia

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Elsődleges és másodlagos térszerkezeti adatbázisok, kísérletileg meghatározott szerkezetek minőségének ellenőrzése, domének azonosítása, másodlagos szerkezeti elemek hozzárendelése, térszerkezetek összehasonlítása és osztályozása, funkcionálisan fontos aminosavak azonosítása, bevezetés a térszerkezet-jóslásba és a nukleinsavak térszerkezetének leírásába.

Kötelező irodalom:

A tantárgy anyagából készült internetes segédanyag.

Ajánlott irodalom:

P.E. Bourne és H. Weissig (szerk.): Structural Bioinformatics. Wiley-Liss, 2003.

Tantárgy neve: Szerves fluorvegyületek kémiája

Kredit: 2

tantárgyfelelős neve/tanszéke: Rábai József egyetemi docens, Szerves Kémia Tanszék

Előtanulmányi feltételek: a vegyész MSc. belépési követelményei, alapvető szerves és szervetlen kémiai ismeretek (ELTE kémia BSc. elvégzése esetén: eredményes vizsga szerves kémia, szervetlen kémia tárgyakból, másoknak: ezzel ekvivalens ismeretek)

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

A fluorkémia története és a fluorvegyületek szerepe a modern társadalmak életében. A fluor kémiai tulajdonságai és vegyületei. Nevezéktan és spekroszkópai jellemzők. A fluor és fluortartalmú szubsztituensek hatása a kémiai reakciók sebességére. Szerves fluorvegyületek előállítására alkalmas fontosabb szintetikus módszerek. Szelektív és kimerítő fluorozás. A fluortartalmú szubsztituensek agrokémiai és gyógyszerkémiai szerepe. Az ún. „performance chemicals” anyagok és a fluorkémia kapcsolata. ^{18}F izotóp beépítése PET diagnosztikumokba. A fluoros kétfázisú katalízis és a fluoros kémia alapjai. A fluorofilitás és a molekulaszervezet kapcsolata. Szerves és szervetlen fluorvegyületek alkalmazása szerves kémiai szintézisekben.

Kötelező irodalom*:

(1) Horváth, I. T.; Rábai, J. *Science* **1994**, *266*, 72 ; idem: US Patent 5,463,082, **1995**; *Chem. Abstr.* **1995**, *123*, 87349; (3) Horváth, I. T.; et al. *J. Am. Chem. Soc.* **1998**, *120*, 3133; (4) Curran, D. P., et al. *Science* **1997**, *275*, 823; (5) Curran D. P., et al. *Science* **2001**, *291*, 1766.

Ajánlott irodalom:

(1) Handbook of Fluorous Chemistry, Eds.: J. A. Gladysz, D. P. Curran, I. T. Horváth; Wiley-VCH, Weinheim, 2004.
(2) 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.
(3) Chemistry of Organic Fluorine Compounds, 2nd ed., M. Hudlicky; Ellis Horwood and Prentice Hall, New York, 1976, 1992.
(4) Organofluorine Chemistry — Principles and Commercial Applications, Eds.: R. E. Banks, B. E. Smart, J. C. Tatlow; Plenum, New York, 1994.
(5) Fluorine Compounds — Chemistry and Applications; N. Ishikawa, Y. Kobayashi; Kodansha Scientific, 1979

Tantárgy neve: Szerves kémia 3

Kredit: 2

tantárgyfelelős neve/tanszéke: Szabó Dénes egyetemi docens, Szerves Kémia Tanszék

Előtanulmányi feltételek: a vegyész MSc. belépési követelményei, alapvető szerves és szervetlen kémiai ismeretek (ELTE kémia BSc. elvégzése esetén: eredményes vizsga szerves kémia, szervetlen kémia tárgyakból, másoknak: ezzel ekvivalens ismeretek)

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Alifás, aromás és heteroaromás vegyületek szerkezeti jellemzői és szintézisük tervezése. Szubsztitúciós, addíciós, eliminációs és átrendződéses reakciók mechanizmusa és szintetikus felhasználásuk szénvegyületek előállítására. A szerves kémiai reakciók sztereokémiai jellegzetességei, sztereospecifikus átalakulások, aszimmetriás szintézisek. Fontosabb szerves vegyipari reakciók. A kémiai irodalmazás megismerése.

Ajánlott irodalom:

Bruckner Győző: Szerves kémia I-III, Tankönyvkiadó

J. March: Advanced Organic Chemistry, John Wiley and Sons

R.T. Morrison, R.N. Boyd: Organic chemistry, Allyn and Bacon, Inc

Tantárgy neve: Szerves kémiai szintézisek mikromérettől a félüzemi méretig.

Kredit: 8

tantárgyfelelős neve/tanszéke: Jalsovszky István egyetemi docens, Szerves Kémia Tanszék

Előtanulmányi feltételek: a vegyész MSc. belépési követelményei, alapvető szerves és szervetlen kémiai ismeretek (ELTE kémia BSc. elvégzése esetén: eredményes vizsga szerves kémia, szervetlen kémia tárgyakból, BSc. szerves kémiai laboratóriumi gyakorlatok sikeres elvégzése; másoknak: ezzel ekvivalens ismeretek)

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Szilárd- és oldatfázisú mikroméretű szintézisek; Kombinatorikus kémia 1-2 grammos méretben; Egyedi szintézisek korszerű szintézismódszerek alkalmazásával 100 – 500g-os méretben. 1 – 1 kiválasztott szintézis méretnövelése. Anyagforgalmi diagramok készítésének elsajátítása.

Ajánlott irodalom:

Richard C. Larock: Comprehensive Organic Transformations (VCH, ISBN: 3-527-26953-3)

Tantárgy neve: Szerves spektroszkópia gyakorlat**Kredit:** 4**tantárgyfelelős neve/tanszéke:** Vass Elemér egyetemi docens, Szerves Kémia Tanszék**Előtanulmányi feltételek:** a vegyész MSc. belépési követelményei, alapvető szerves kémiai és spektroszkópai ismeretek (ELTE kémia BSc. elvégzése esetén: eredményes vizsga szerves kémia (2) valamint szerves spektroszkópia tárgyból, másoknak: ezzel ekvivalens ismeretek)**Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:**

A tárgy elvégzése során a hallgatók a szerves- és biomolekulák kutatásában leggyakrabban alkalmazott műszeres analitikai módszerekkel ismerkednek meg. A metodikai alapismeretek elsajátítása mellett olyan komplex mérési feladatokat végeznek el, melyek a módszerek alkalmazhatóságára és korlátaira is rámutatnak. A bemutatott vizsgálati módszerek sokfélesége a hallgatók kritikai érzékét kívánja fejleszteni annak érdekében, hogy egy konkrét probléma megoldására mindig a legmegfelelőbb eljárást tudják kiválasztani, és több szerkezetvizsgálati módszer kombinálásával egy ismeretlen vegyület szerkezetét ki tudják deríteni. A gyakorlat betekintést nyújt a biomolekulák térszerkezetének vizsgálatába is. A tárgy ultraibolya-látható, infravörös-, NMR-, CD-spektroszkópai, valamint szerves- és biomolekuláris tömegspektrometriai gyakorlatokat foglal magában.

Kötelező irodalom:

Műszeres Szerves Analitikai Gyakorlatok, Egyetemi jegyzet, összeállította az ELTE Szerves Kémiai Tanszék munkaközössége, Budapest (1995).

Joseph B. Lambert, Herbert F. Shurvell, David A. Lightner, R. Graham Cooks: Organic Structural Spectroscopy, Prentice Hall, Upper Saddle River, New Jersey, USA (2001).

Ajánlott irodalom:

Ruff Ferenc: Szerves vegyületek szerkezetvizsgálata spektroszkópai módszerekkel – Infravörös spektroszkópia, jegyzet, Eötvös Loránd Tudományegyetem, Természettudományi kar, Tankönyvkiadó, Budapest (1991).

Ruff Ferenc: Szerves vegyületek szerkezetvizsgálata spektroszkópai módszerekkel – Ultraibolya spektroszkópia, jegyzet, Eötvös Loránd Tudományegyetem, Természettudományi kar, Tankönyvkiadó, Budapest (1991).

Hollósi Miklós, Laczkó Ilona, Majer Zsuzsa: A sztereokémia és kiroptikai spektroszkópia alapjai, Nemzeti Tankönyvkiadó, Budapest (2003).

L.D. Field, S. Sternhell, J.R. Kalman: Organic Structures from Spectra, third edition, John Wiley & Sons, Chichester, UK (2002).

Tantárgy neve: Szerves spektroszkópia

Kredit: 2

tantárgyfelelős neve/tanszéke: Vass Elemér egyetemi docens, Szerves Kémia Tanszék

Előtanulmányi feltételek: a vegyész MSc. belépési követelményei, alapvető szerves kémiai ismeretek (ELTE kémia BSc. elvégzése esetén: eredményes vizsga szerves kémia (2) tárgyból, másoknak: ezzel ekvivalens ismeretek)

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Az előadás célja a szerves vegyületek szerkezetvizsgálatában alkalmazott legfontosabb spektroszkópiai módszerek elméleti alapjainak ismertetése, valamint a komplex spektrumértékeléshez szükséges ismeretek elsajátítása. Az előadás tematikáját az UV-látható, infravörös, NMR-, tömeg-, valamint elektronikus és rezgési cirkuláris dikroizmus (CD és VCD) spektroszkópia képezi.

Kötelező irodalom:

Joseph B. Lambert, Herbert F. Shurvell, David A. Lightner, R. Graham Cooks: Organic Structural Spectroscopy, Prentice Hall, Upper Saddle River, New Jersey, USA (2001).

Ajánlott irodalom:

Ruff Ferenc: Szerves vegyületek szerkezetvizsgálata spektroszkópiai módszerekkel – Infravörös spektroszkópia, jegyzet, Eötvös Loránd Tudományegyetem, Természettudományi kar, Tankönyvkiadó, Budapest (1991).

Ruff Ferenc: Szerves vegyületek szerkezetvizsgálata spektroszkópiai módszerekkel – Ultraibolya spektroszkópia, jegyzet, Eötvös Loránd Tudományegyetem, Természettudományi kar, Tankönyvkiadó, Budapest (1991).

Hollósi Miklós, Laczkó Ilona, Majer Zsuzsa: A sztereokémia és kiroptikai spektroszkópia alapjai, Nemzeti Tankönyvkiadó, Budapest (2003).

L.D. Field, S. Sternhell, J.R. Kalman: Organic Structures from Spectra, third edition, John Wiley & Sons, Chichester, UK (2002).

Tantárgy neve: Szerves kémiai szintézisek haladóknak.

Kredit: 2

tantárgyfelelős neve/tanszéke: Jalsovszky István egyetemi docens, Szerves Kémia Tanszék

Előtanulmányi feltételek: a vegyész MSc. belépési követelményei, alapvető szerves és szervetlen kémiai ismeretek (ELTE kémia BSc. elvégzése esetén: eredményes vizsga szerves kémia, szervetlen kémia tárgyakból, BSc. szerves kémiai laboratóriumi gyakorlatok sikeres elvégzése; másoknak: ezzel ekvivalens ismeretek)

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Hatékony reakciók szén-szén kötés kialakítására; Funkciós csoportok átalakítása;
Retroszintetikus analízis; Tankönyvből jól ismert reakciók szintetikus alkalmazása során tapasztalt meglepő kísérleti tények.

Ajánlott irodalom:

Richard C. Larock: Comprehensive Organic Transformations (VCH, ISBN: 3-527-26953-3)

Tantárgy neve: Sztereokémia és kiroptikai spektroszkópia

Kredit: 2

tantárgyfelelős neve/tanszéke: Hollósi Miklós egyetemi tanár, Szerves Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: a vegyész MSc. belépési követelményei, alapvető szerves kémiai ismeretek (ELTE kémia BSc. elvégzése esetén: eredményes vizsga szerves kémia és fizikai kémia tárgyakból, másoknak: ezzel ekvivalens ismeretek)

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Sztereokémiai alapfogalmak. Sztereoizomerek. Szimmetria. Konfiguráció és konformáció. Sztereoizomerek 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

Tantárgy neve: Totálszintézisek klasszikusai

Kredit: 2

tantárgyfelelős neve/tanszéke: Soós Tibor (Ph.D.), Biomolekuláris Intézet, Magyar Tudományos Akadémia

Előtanulmányi feltételek: a vegyész MSc. belépési követelményei, alapvető szerves és fémorganikus kémiai ismeretek (ELTE kémia BSc. elvégzése esetén: eredményes vizsga szerves kémia, fémorganikus kémia tárgyakból, másoknak: ezzel ekvivalens ismeretek)

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

A totál szintézisek területének legjelentősebb és legkiemelkedőbb teljesítményeinek válogatása, amely körbe a reserpin, a prosztaglandinok, a B₁₂ vitamin, a taxol, a calicheamicin, mentol, epothilonok szintézise tartozik. A szintetikus kulcslépések mechanizmusának, szelektivitásának és sztereoszelektivitásának részletes tárgyalásán keresztül tovább mélyíthető a szintetikus stratégiák megértése. Ezen túlmenően külön hangsúlyt kapnak a katalitikus, aszimmetrikus és fémorganikus szintetikus módszerek fejlődésének bemutatása.

Kötelező irodalom: Nicolaou K. C., Sorensen E. J. Classics in Total Synthesis , Wiley, 1996 and Nicolaou K. C., Snyder S. A. Classics in Total Synthesis II, Wiley, 2003

Tantárgy neve: Vegyipari Művelettan

Kredit: 2

tantárgyfelelős neve/tanszéke: Horváth István Tamás, Szerves Kémia Tanszék

Előtanulmányi feltételek: Matematika, fizikai, szervetlen és szerves kémia

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Bevezetés a művelettanba: alapfogalmak, mérlegegyenletek, áramlástan. Kémiai reaktorok: reaktortípusok bemutatása, modellezése, ipari példák bemutatása. Egyensúlyi komponensátadási műveletek: desztilláció, rektifikáció, abszorpció, adszorpció, extrakció, szárítás, kristályosítás, ipari példák bemutatása. Nemegyensúlyi komponensátadási műveletek: membránszeparáció, mikro- és ultraszűrés, dialízis, ipari példák bemutatása. Kombinált műveletek: extraktív, reaktív és azeotróp desztilláció, ipari példák bemutatása. Hidrodinamikai műveletek: szűrés, ülepités, por- és cseppleválasztás, centrifugálás. Hőátadási műveletek: hőcsere, bepárlás. Kromatográfiás elválasztási műveletek (P-HPLC, SMB-HPLC). Bevezetés a folyamatirányításba

Kötelező irodalom*:

Gerecs Árpád: Bevezetés a kémiai technológiába, Nemzeti Tankönyvkiadó, Budapest, 1973;
Fonyó – Fábri: Vegyipari Művelettan Alapismeretek, Nemzeti Tankönyvkiadó, Budapest, 1998.

Ajánlott irodalom:

Perry, Vegyészmérnökök kézikönyve, Műszaki könyvkiadó, Budapest, 1968.

Tantárgy neve: Zöld kémia

Kredit: 2

tantárgyfelelős neve/tanszéke: Horváth István Tamás egyetemi tanár, Szerves Kémia

Tanszék

Előtanulmányi feltételek: a vegyész MSc. belépési követelményei, alapvető szerves és szervetlen kémiai ismeretek (ELTE kémia BSc. elvégzése esetén: eredményes vizsga szerves kémia, szervetlen kémia tárgyakból, másoknak: ezzel ekvivalens ismeretek)

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Noha a kémia meghatározó szerepet játszik mindennapi életünkben, a kémia pozitív szerepének elismerése észrevehetően csökkent az elmúlt évtizedekben. 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 alóállító technológiáknak környezeti szerepét.

A speciális kollégium célja a zöld kémia alapjainak és alkalmazásának bemutatása:

1. A zöld kémia kialakulása és alapelvei
2. A klór alkalmazása körüli vita
3. Szintézismódszerek toxikus vegyületek nélkül
4. Toxikus nehézfém-ionok kezelése
5. Termék(kek)től könnyen elválasztható reagensek és katalizátorok
6. Biokatalízis és biosokféleség (biodiversity)
7. A sztereokémia szerepe a zöld kémiában
8. Növényvédőszer
9. Az újrafelhasználás kémiája
10. A népességnövekedés környezetkémiai vonatkozásai
11. Környezeti szempontok a versenyképes gazdálkodásban

Kötelező irodalom*:

P.T.Anastas, J.C. Warner: Green Chemistry, Oxford University Press, Oxford, 1998

Ajánlott irodalom:

Tantárgy neve: Zöld kémia labor

Kredit: 4

tantárgyfelelős neve/tanszéke: Horváth István Tamás egyetemi tanár, Szerves Kémia

Tanszék

Előtanulmányi feltételek: a vegyész MSc. belépési követelményei, alapvető szerves és szervetlen kémiai ismeretek (ELTE kémia BSc. elvégzése esetén: eredményes vizsga szerves kémia, szervetlen kémia tárgyakból, másoknak: ezzel ekvivalens ismeretek)

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

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 laboratórium célja a zöld kémia alkalmazásának bemutatása: alkének halogénezése, alkoholok dehidratációja, ciklohexén előállítása, adipinsav előállítása, porfirin szintézis, oldószermentes, szilárd fázisú szintézis mikrohullámú fűtéssel. elektrofil aromás jódózás, benzofurán szintézis, mikrohullámmal segített Diels-Alder reakció, bioszintetikus etanol, biodizel, benzoin kondenzáció, Pechman reakció, napfény átalakítás

Kötelező irodalom:

A www.kemtech.net honlapon Zöld Kémia Laboratóriumi Gyakorlatok anyaga

James E. Hutchington, Kenneth M. Doxee; Green Chemistry in Education Workshop (University of Oregon)

K. L. Williamson, Macroscale and Microscale Organic Experiments, 2nd Ed. 1994, Houghton Mifflin

Ajánlott irodalom:

P.T.Anastas, J.C. Warner: Green Chemistry, Oxford University Press, Oxford, 1998

Tantárgy neve: Alkalmazott számítógépes szimulációk

Kredit: 2

Tantárgyfelelős neve/tanszéke: Túri László, Fizikai Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: Kémia BSc törzsanyaga fizikai és elméleti kémiából

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

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

Ajánlott irodalom:

M. P. Allen, D. J. Tildesley, Computer Simulation of Liquids, Oxford University Press, 2003

J. M. Thijssen, Computational Physics, Cambridge University Press, 2000

D. Marx, és J. Hütter, Ab Initio Molecular Dynamics: Theory and Implementation (Modern Methods and Algorithms of Quantum Chemistry, szerkesztő: J. Grotendorst, John von Neumann Institute for Computing, Jülich, 1. kötet, 301-449, 2000)

Tantárgy neve: Anyagszerkezet-vizsgáló módszerek I: atomi mérettartomány

Kredit: 2

Tantárgyfelelős neve/tanszéke: Kiss Éva (Sinkó Katalin) Fizikai Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: műszeres analitika, fizikai kémia

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Anyagszerkezet-vizsgáló módszerek atomi mérettartományban

Számítási, modellezési módszerek áttekintése; Infravörös és RAMAN spektroszkópia (mintavételi módszerek, transzmissziós és reflexiós módszerek, mikroszkópos vizsgálatok, polimerek, kerámiák és kompozit anyagok spektroszkópiái vizsgálata); NMR spektroszkópia (atomok közötti kölcsönhatási formák és jellemző NMR spektroszkópiás paraméterek jellemzése, mérési technikák Pulzus Fourier NMR, multipulzus és gradiens technikák oldat-fázisban, alapvető szilárd NMR mérések álló és forgómintákon, kristályos, géles és üveges szilárd anyagok multinukleáris NMR jellemzése); Tömegspektroszkópia (kis és közepes molekulatömegű vegyületek, polimerek, biomolekulák, fémek és fémötvözetek vizsgálata); Mössbauer-spektroszkópia (ötvözetek fázisanalízise, koordinációs kémiai alkalmazások, biológiai rendszerek vizsgálata); Pozitron annihiláció (annihilációs paraméterek és anyagszerkezet összefüggése, a pozitron termalizációja, mérési módszerek: szögkorreláció, gázok, folyadékok, amorf szilárd anyagok, kristályok, fémek példái) Számítási, modellezési módszerek az anyagtudományban

Kötelező irodalom*:

Bertóti I., Marosi Gy., Tóth A.(szerk): Műszaki felülettudomány és orvosbiológiai alkalmazásai

B+V, Budapest, 2003.

Homonnay Z. A kémia újabb eredményei 93., Akadémiai Kiadó, Budapest, 2004.

angol:

Nagy S., Vértes A., Szeles Cs. A szilárdtestkutatás újabb eredményei 16., Akadémiai Kiadó, Budapest, 1986.

Ajánlott irodalom:

Rohonczy J.: Szilárd anyagok szerkezetvizsgálata MQMAS NMR módszerrel, Akadémiai Kiadó, Budapest, 2006.

B.W. Rossiter, R.C. Baetzold (Eds.) Physical Methods of Chemistry, vol IXB Investigations of surfaces and Interfaces, Wiley, N. Y. 1993.

Greenwood, Gibb: Mössbauer Spectroscopy, Chapman and Hall, London, 1971.

Schrader, Jean: Positron and positronium Chemistry, Elsevier, Amsterdam, 1988.

Tantárgy neve: Az anyagtudomány új kémiai módszerei B

Kredit: 2

Tantárgyfelelős neve/tanszéke: Kiss Éva, Sinkó Katalin, Fizikai Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: fizikai kémia, kolloidkémia

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Nanodiszperz rendszerek előállítása és stabilitása, spontán képződő nanorendszerek. Polielektrolit/tenzid nanokomplexek és nanorészecskék. Responzív nanostruktúrák előállítása tömbfázisban és határrétegben. Határfelületi tulajdonságok szabályozása makromolekulákkal.

Vezető polimerek előállítása és alkalmazása. Kémiai gőzfázisú leválasztás. Felületmódosítás elektrokémia módszerekkel. Rendezett molekuláris nanorétegek, önrendeződő, Langmuir- és Langmuir-Blodgett filmek

Kötelező irodalom*:

Kiss É. A kémia újabb eredményei, 95. Akadémiai Kiadó, Budapest, 2006.

Ajánlott irodalom:

J. Frommer, R.M. Overney, Interfacial Properties on the Submicrometer Scale, Am. Chem. Soc., Washington, 2000.

C.N.R. Rao, A. Müller, A.K. Cheetham, The Chemistry of Nanomaterials, Wiley-VCH Verlag, Weinheim, 2004.

Tantárgy neve: Bevezetés a kémiai termodinamikába

kredit: 2

tantárgyfelelős neve: Dr. Keszei Ernő

tanszéke: Fizikai Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: valamely természettudományi BSc szak törzsanyaga matematikából és fizikából

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Bevezető áttekintés: A fizikai kémia tárgya, témaköre. A termodinamika történetének és különböző tárgyalásmódjainak áttekintése. Az axiomatikus termodinamika. Egyszerű rendszerek termodinamikai leírása. Egyensúlyok izolált és hőszigetelt rendszerekben. Fundamentális egyenletek és állapotegyenletek. Egyensúlyok állandó nyomáson, állandó hőmérsékleten, valamint állandó nyomáson és hőmérsékleten. Termodinamikai potenciálfüggvények és azok összefüggései.

Részletes kémiai termodinamika: Több kémiai komponenset tartalmazó termodinamikai rendszerek leírása: többkomponensű elegyek termodinamikája. Ideális elegyek és reális elegyek kémiai potenciálja. Az abszolút aktivitás és a relatív aktivitás. Kolligatív tulajdonságok: gőznyomás-csökkenés, fagyáspont-csökkenés, forráspont-emelkedés, szublimációs pont-emelkedés, pórútos diffúzió és ozmózisnyomás. Ideális és reális elegyek kétkomponensű fázisdiagramjai. Kémiai reakciók termodinamikája ideális és reális elegyekben. Kémiai reakciók egyensúlyának hőmérséklet- és nyomásfüggése. A Le Chatelier-Braun elv. Elektromosan töltött részecskéket tartalmazó rendszerek termodinamikája. Az elektroneutralitás elve. Az elektrokémia tárgyköre, az elektrokémiai potenciál. A heterogén elektrokémiai rendszerek egyensúlyai. A galváncellák és az elektródok jellemzése, a pH definíciója.

A kémiai kinetika elemei: A reakciósebesség. Egyszerű és összetett reakciók. Bonyolult reakciók kinetikai leírása. Elektródreakciók, az elektródfolyamatok kinetikáját leíró fontosabb összefüggések. Elemi reakciók elméletei. Reakciókinetikai kísérletek.

Kötelező irodalom: P. W. Atkins: Fizikai kémia, Budapest, 2002
Keszei Ernő: Bevezetés a kémiai termodinamikába
(készülő jegyzet)

Ajánlott irodalom: H.B. Callen: Thermodynamics, an Advanced Treatment for Chemists and Physicists, New York, 1985
E. A. Guggenheim: Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics, Amsterdam, 1950

Tantárgy neve: Biokompatibilis felületek

Kredit: 2

Tantárgyfelelős neve/tanszéke: Kiss Éva, Fizikai Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: Kolloidkémia, fizikai kémia

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

A biokompatibilitás fogalma, bioanyagok felhasználása. Műanyag bioanyagok, a polimer felület dinamikája. A „bioválasz” elemzése a határfelületi kölcsönhatás szempontjából. Felületmódosítási és felülettervezési stratégiák. Kísérleti módszerek a biofelületek és biológiai eredetű folyadékok kölcsönhatásának tanulmányozására. A fehérje adszorpció szerepe, sajátosságai, tanulmányozásának lehetőségei. Gyakorlati példák az implantátumok, az orvosi eszközök és a gyógyszerhordozó rendszerek köréből.

Kötelező irodalom*:

J. D. Andrade: Surface and Interfacial Aspects of Biomedical Polymers, Plenum Pr. N.Y. 1985.

B. D. Ratner, A. S. Hoffman, F. J. Schoen, J. E. Lemons: Biomaterials Science, Academic Pr. San Diego, 1996.

Ajánlott irodalom:

Kiss Éva: Kardiovaszkuláris anyagok. Műszaki felülettudomány és orvosbiológiai alkalmazásai. (Szerk: Bertóti Imre, Marosi György, Tóth András) B+V Kiadó, Budapest, 2003. pp 260-277.

Medical Devices tudományos közleményei

Tantárgy neve: Elektronszerkezet számítási módszerei előadás

Kredit:2+0

Tantárgyfelelős neve/tanszéke: Szalay Péter egyetemi tanár, Fizikai Kémiai Tsz.

Előtanulmányi feltételek: Molekulák elektronszerkezete

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Az előadás során a hallgatók megismerkedhetnek azokkal az elméleti módszerekkel és eljárásokkal, amelyeket az elektronszerkezet leírására használhatunk. Mind az ún. ab initio, mind pedig DFT módszerek szerepelnek az anyagban. A fő cél a módszerek alkalmazhatóságának és korlátainak bemutatása abból a célból, hogy munkájuk során kritikusan tudják használni ezeket a széles körben alkalmazott eljárásokat.

Kötelező irodalom*:

Az előadás jegyzetelt anyaga, kiadható/internetes vázlat

Attila Szabo és Neil S. Oslund: Modern Quantum Chemistry, Dover Publications, 1996

Ajánlott irodalom:

Tantárgy neve: Elektronszerkezet számítási módszerei gyakorlat

Kredit:0+2

Tantárgyfelelős neve/tanszéke: Szalay Péter egyetemi tanár, Fizikai Kémiai Tsz.

Előtanulmányi feltételek: Elektronszerkezet számítási módszerei előadás

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

A gyakorlat célja, hogy a hasonló nevű előadáson megismert módszereket gyakorlatban is alkalmazhassák a hallgatók. A módszereket különböző programcsomagok segítségével használjuk, így a hallgatók sokoldalúan képzettek lesznek elektronszerkezet modern módszereinek gyakorlati alkalmazására. A gyakorlatok anyagát úgy állítjuk össze, hogy minél többféle molekuláris tulajdonság számítását elsajátíthassák a hallgatók. A programcsomagok: Gaussian, Aces2, Turbomole, Columbus stb.

Kötelező irodalom*:

Az előadás jegyzetelt anyaga, kiadható/internetes vázlat

A programcsomagok leírásai

Ajánlott irodalom:

Attila Szabo és Neil S. Ostlund: Modern Quantum Chemistry, Dover Publications, 1996

Tantárgy neve: Elektrosztatikus kölcsönhatások kolloid rendszerekben

Kredit: 2+0

Tantárgyfelelős neve/tanszéke: Gilányi Tibor, Fizikai Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: Kémia BSc törzsanyaga kolloidika és felületkémiából

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

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.

Kötelező irodalom*:

Az előadás jegyzetelt anyaga.

Ajánlott irodalom:

R. J. Hunter: Foundation of Colloid Science, Clarendon Press, Oxford, 1993.

Tantárgy neve: Elemi reakciódinamika

Kredit: 2

Tantárgyfelelős neve/tanszéke: Túri László, Fizikai Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: Kémia BSc törzsanyaga fizikai és elméleti kémiából

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

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

Adiabatikus és nem-adiabatikus reakciódinamika

Nem-reaktív dinamika; bevezetés a transzfer folyamatok dinamikájába

Kötelező irodalom*:

Az előadás jegyzetelt anyaga, kiadható/internetes vázlat

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

Tantárgy neve: Elméleti Anyagszerkezetkutatás

Kredit: 2

Tantárgyfelelős neve/tanszéke: Surján Péter, Fizikai Kémia

Előtanulmányi feltételek: Kvantummechanika, Elméleti Kémia

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Az anyagszerkezetkutatás elméleti modelljei és számítási módszerei. Fizikai alaptörvények és jelenségek: Jahn-Teller tétel, Peierls tétel, stb. Jelenségek és mérések értelmezése. Polimerek, kristályok, amorf anyagok fenomenológiája, geometriai viszonyai és elektronszerkezete. Néhány konkrét anyagcsalád (konjugált polimerek, fullerének, nanocsövek, stb.)

Kötelező irodalom*: az előadáson kiosztott segédanyag

Ajánlott irodalom:

Tantárgy neve: Elméleti módszerek a fehérjekutatásban

Kredit: 2

Tantárgyfelelős neve/tanszéke: Fuxreiter Mónika, MTA Enzimológiai Intézet

Előtanulmányi feltételek: fizikai-kémia

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

A tárgy célja, hogy megismertesse a hallgatókat azokkal a számítási módszerekkel, melyekkel biomolekulák szerkezete és működése vizsgálható. Bemutatja az elméleti megközelítések hátterét, felhasználhatóságát, alkalmazásuk korlátait. Minden módszernél hangsúlyt helyez a számolt adatok és levont következtetések kísérleti eredményekkel történő összevetésére is. Bemutatja, hogy melyik elméleti eljárás milyen kísérleti módszerekkel ad összehasonlítható eredményeket, illetve melyeket egészít ki. Az előadások során a hallgatók megismerkedhetnek a szerkezeti biológia néhány aktuális problémájával és ezek lehetséges megoldásaival. Fontosnak tartom, hogy az ismertetett módszerek tükrözzék a tudomány jelenlegi állását. A speciális kollégium célja egyfajta szemlélet-formálás. Szeretné bemutatni, hogy az elméleti eljárások nagyban segíthetik a biológiai problémák megértését és jól definiált közelítésekkel kvantitatív eredményeket adnak olyan esetekben, mikor kísérletileg csak feltételezésekig vagy kvalitatív eredményekig juthatunk.

Bevezetés. Szerkezeti biológiai problémák. Modellalkotás, Erőterek. Potenciálok fejlesztése és tesztelése. Molekulamechanikai számítások. Molekuladinamikai számítások. Szerkezetmeghatározási alkalmazások. MD analízis, Monte Carlo számítások biomolekulákra. Irányított mintavételezések., Fehérjeszerkezet-analízis. Szerkezet-jósló módszerek. Homológia modellezés., Elektrosztatikus számítások. Mikroszkopikus és makroszkopikus közelítések. pKa számítások, Szabadenergia-számítások-Nehézségek., Enzimreakciók I – Kvantummechanikai leírás., Enzimreakciók II – Környezet figyelembe vétele, katalízis oldatfázisban, Enzimreakciók III – Aktiválási energia számítások., Enzimreakciók IV- Enzimatis katalízis értelmezése. Elméletek., A racionális gyógyszertervezés lehetőségei.

Kötelező irodalom*: interneten elérhető jegyzet

Ajánlott irodalom: Andrew Leach : Computer modelling

Arieh Warshel: Computer modelling of chemical reactions in enzymes and solutions

Tantárgy neve: Érdekességek az elméleti kémia tárgyköréből

Kredit: 2

Tantárgyfelelős neve/tanszéke: Császár Attila, Fizikai Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: Kémia BSc törzsanyaga fizikai és elméleti kémiából

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

A kvantummechanika és a klasszikus mechanika kapcsolat: bizonytalansági relációk makroszkopikus mozgásokra; hullámfüggvények szuperpozíciójaként előálló hullámcsomagok. Operátorok időfüggése: az Ehrenfest-tétel; a viriáltétel. Az atomok elektronszerkezete: konfiguráció és állapot kapcsolata; állapotok egzakt jellemzése; spin-pálya csatolás. A Hartree–Fock módszer: a H_2 molekula energiája determináns hullámfüggvénnyel; a HF módszer levezetésének fontosabb lépései. A HF módszer típusai. A kvantumkémiai számításokban használt bázisok: Slater- és Gauss-függvények; kontrahálás fogalma; a bázisok jelölése. A Hartree–Fock- módszer pontossága (a kiadott táblázatok alapján). Átmenetifém-komplexek elektronszerkezete. A Kristálytér- és a Lingandumtér-elméletek. Oktaéderes és tetraéderes komplexek elektronszerkezete. A viriáltétel és spektroszkópiai következményei. Kommutátor algebra. Kiválasztási szabályok meghatározása egyszerű modellekre (potenciálgödör, harmonikus lineáris oszcillátor). Magmozgások szétválasztása. Lagrange és Hamilton függvények, valamint használatuk az elméleti kémiában. Elektronszínképek meghatározása a Hückel-modell keretén belül. A spin-spin csatolás kvantummechanikai tárgyalása.

Kötelező irodalom*

- (1) Török Ferenc (Szerk.): A kémiai szerkezetvizsgáló módszerek elmélete, ELTE TTK jegyzet: 1974.
- (2) Kapuy Ede, Török Ferenc: Az atomok és molekulák kvantumelmélete, Akadémiai Kiadó: Budapest, 1975.
- (3) Császár Attila: Előadási fóliák (fénymásolat, ELTE TTK KTCS könyvtár).

Ajánlott irodalom:

- (1) Ira N. Levine: *Molecular Spectroscopy*, Wiley-Interscience: New York, 1975.
- (2) Ira N. Levine: *Quantum Chemistry*, Wiley-Interscience: New York, 1999.

Tantárgy neve: Fémek korróziója és elektrokémiai leválasztása

Kredit: 2

Tantárgyfelelős neve/tanszéke: Sziráki Laura, egyetemi docens, Fizikai Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: kémiai BSc törzsanyaga fizikai kémiából

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

A tantárgy célja megismertetni a) a fémek környezeti reakcióinak fizikai kémiai alapjait, b) a fémek, ötvözetek, szerkezeti anyagok korróziójának mérésére és kontrollálására szolgáló elveket és eljárásokat, c) a hagyományos és korszerű elektrokémiai ipari fémleválasztási technikák elvi és gyakorlati alapjait, valamint azok környezetkárosító és környezetvédő hatásait. A korrózió sebesség mérésének módszereit és a fémleválasztás technikáját laboratóriumi gyakorlaton is demonstráljuk.

Kötelező irodalom*: Az előadás jegyzetelt anyaga, kiadható vázlat.

Környezetkémiai analitika- környezettechnológiai praktikum Szerkesztők: Varga Enikő és Garai Tibor, X.- XIII. fejezet, 223-294, ELTE Eötvös Kiadó Budapest 1999.

Ajánlott irodalom: Dévay József: Fémek korróziója és korrózióvédelme Műszaki Könyvkiadó Budapest, 1979

Kiss László: Bevezetés az elektrokémiába, egyetemi jegyzet, 1997.

Dévay József, Passzivitás, réskorrózió, lyukkorrózió, A fémek feszültségkorróziója, Akadémiai Kiadó, 1979, Kém. újabb eredményei 44. kötet .

Tantárgy neve: Femtokémia

kredit: 2

tantárgyfelelős neve: Dr. Keszei Ernő

tanszéke: Fizikai Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: kémia BSc törzsanyag fizikai kémiából

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Bevezető áttekintés: A femtokémia tárgyköre. Kinetikatörténeti áttekintés. Lézerek, lézerfotolízis. Az időfelbontás fejlődése. Speciális problémák az időfelbontás növelése során. Időskála a kémiában. Molekuláris történések a 10^{-18} - 10^{-10} másodperc időtartományban.

Nemlineáris optika: Optikai alapismeretek: geometriai optika, tükrök, lencsék, prizmák, optikai szálak; hullámoptika: hullámegyenletek, megoldásaik, optikai eszközök hullámoptikai leírása. Skalár- és vektoroptika. Polarizáció. Nemlineáris optikai jelenségek.

Felharmonikuseltetés, önfázis-moduláció, önfókuszálás, optikai parametrikus oszcillátor és erősítő, Kerr-lencse. Gauss nyalábok optikai leírása. Lézerek, impulzuszézerek, félvezető-lézerek, fotodetektorok. Ultragyors lézerimpulzusok előállítás, erősítése. Pumpa-próba mérések. Kémiai reakciók kvantumkontrollja

Részletes tárgyalás: Lézerimpulzusok spektrális és időbeli jellemzése.

A transzformációkorlátozott impulzus. Időmérés a szubpikoszekundumos tartományban. Két- és háromimpulzusos mérési módszerek. A pumpa-próba mérés kvantitatív leírása.

A konvolúció hatása a kinetikai mérési eredményekre. Dekonvolúciós módszerek és alkalmazhatóságuk. Unimolekulás reakciók dinamikájának tanulmányozása pumpa-próba módszerrel. Intermolekuláris potenciálok rekonstrukciója femtokémiai mérések alapján.

Molekuláris anizotropia tanulmányozása. Bimolekulás reakciók indítása és nyomonkövetése pumpa-próba módszerrel.

Kötelező irodalom: Keszei Ernő: Femtokémia; a pikoszekundumnál rövidebb reakciók kinetikája, Akadémiai Kiadó Budapest, 1999

Ajánlott irodalom: B. A. Saleh, M. C. Teich: Fundamentals of Photonics, John Wiley & Sons

Tantárgy neve: Fizikai kémiai laboratóriumi mérések elméleti háttere: optikai, elektromos, mágneses és elektrokémiai tulajdonságok

Kredit: 2+0

Tantárgyfelelős neve/tanszéke: Láng Győző, Kémiai Intézet, Fizikai Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: Kémiai BSc törzsanyaga fizikai kémiából

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása: Az MSc „Fizikai kémiai laboratóriumi gyakorlatok haladóknak” tárgy keretében elvégzendő kísérletekhez kapcsolódó elméleti anyag tárgyalása. A fény és anyag kölcsönhatásán alapuló módszerek elvi alapjai, spektrofotometriás módszerek, a törésmutató mérése, és a mérésekből levonható következtetések. Az interferometriás módszerek elvi alapjai. A polárizált fény tulajdonságai, polariméterek. Elektródfolyamatok kinetikája. Váltóáramú technikák, az impedancia mérése. A kvarckristály mikromérleg működésének elvi alapjai. A permittivitás és a dipólusmomentum mérése. Mágneses tulajdonságok, magnetosztatikai mérések. Tranziens jelek mérése és feldolgozása. A pásztázó alagútmikroszkóp.

Kötelező irodalom*: Szalma József, Láng Győző, Péter László: Alapvető fizikai kémiai mérések és a kísérleti adatok feldolgozása, Eötvös Kiadó, Budapest (2006.); Horányi György, Láng Győző: Zsákutcák, tévutak és csapdák a jelenkori elektrokémia elméletében és kutatásában (A kémia újabb eredményei 90), Budapest (2001); A. J. Bard: Instrumental Methods in Electrochemistry, New York (2001);

Ajánlott irodalom:

R. J. Macdonald: Impedance Spectroscopy, New York (1987); C. J. F. Böttcher: Theory of Electric Polarization, Amsterdam (1973); Horányi György, Láng Győző: Perklorátszennyezés (A kémia újabb eredményei 93), Budapest (2004);

Tantárgy neve: Folyadékfázisú kémiai dinamika

Kredit: 2

Tantárgyfelelős neve/tanszéke: Túri László, Fizikai Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: Kémia BSc törzsanyaga fizikai és elméleti kémiából

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Az előadás a folyadékfázisban lezajló molekuláris történések, kémiai reakciók molekuláris dinamikájának konzisztens tárgyalását adja.

Elméleti alapok: klasszikus és kvantum dinamika, klasszikus és kvantum elektrodinamika
Folyadékok, szilárd testek, határfelületek

Módszerek: időkorrelációs függvények, sztochasztikus folyamatok, relaxációs folyamatok

Kvantum statisztikus mechanika, sűrűség operátor

Lineáris válaszmélet

Alkalmazások: vibrációs relaxáció, elektrontranszfer reakciók, spektroszkópia

Kötelező irodalom*:

Az előadás jegyzetelt anyaga, kiadható/internetes vázlat

Ajánlott irodalom:

A. Nitzan, Chemical Dynamics in Condensed Phases; Relaxation, Transfer and Reactions in Condensed Molecular Systems, Oxford University Press, 2006

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

Tantárgy neve: Fotofizika és fotokémiai kinetika

Kredit: 2

Tantárgyfelelős neve/tanszéke: Demeter Attila, MTA KK AKI

Előtanulmányi feltételek: Kémia BSc törzsanyaga fizikai és szerves kémiából

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Az elemi reakciók kinetikája és a fotokémia alapfogalmai.

A radiatív és a sugárzásmentes átmenetek hatása a kémiai történésekre. Energiatranszfer folyamatok. Fotokémiai preparatív módszerek, kinetikai mérési eszközök és adatfeldolgozási eljárások. Kettőslumineszcencia, fotofizikai vizsgálatok. Fotoredukció. A hidrogénatom-transzfer követő gyökreakciók kinetikája. Elektrontranszfer. Marcus elmélet. Excimerek és exciplexek Oldószerreffektusok. Hidrogén-híd kötés. Diffúzió kontrolált folyamatok kinetikája.

Fotocikloaddíció és periciklikus átrendeződési folyamatok. Pályaszimmetria-megmaradás. Fotobomlás. Norris I. és Norris II. folyamatok, a biradikálisok tulajdonságai, tranziens részecskék fotokémiája. Fotooxidáció, kemilumineszcencia, fotokémiai szmog. Biológiai rendszerek, gyakorlati alkalmazások.

Kötelező irodalom*:

Az előadás jegyzetelt anyaga, kiadható/internetes vázlat

Ajánlott irodalom:

<http://www.chemres.hu/scientists/demeter/kandiv.pdf>

<http://www.chemres.hu/scientists/demeter/disszertacio.pdf>

Horvát Attila: Szervetlen Fotokémia (VE Kiadó) bevezető fejezetei.

J.R.Lakowicz: Principles of Fluorescence Spectroscopy, Plenum Press, NY 1983.

Tantárgy neve: Idegrendszeri modellezés

Kredit: 2

Tantárgyfelelős neve/tanszéke: Szalisznyó Krisztina, MTA, RMKI, KFKI

Előtanulmányi feltételek: Előnyt jelent, ha a hallgató analízist és lineáris algebrát már hallgatott, illetve ha tud differenciálegyenleteket kezelni és ha tud angolul, de bárki érdeklődöt szeretettel várunk.

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Az idegsejtek elektrokémiai és -fiziológiai működésének alapjai, a konduktancia-alapú modellek. A párhuzamos konduktancia modell. Az akciós potenciál keletkezése. A Hodgkin-Huxley modell. A Hodgkin-Huxley modell. Ionáramok, ioncsatornák, kapukinetikák. Egyszerűsített modellek. A HH-modell egyszerűsítése: a FitzHugh-Nagumo-Rinzel modell, fázis-sík analízis. Börszülés jelensége, osztályozása, és néhány példa. Pancreas béta sejt. Dinamika alapok. A HH modelltől az az absztrakt modellek felé: ML modell, fázis modell, integrál és tüzel neuron, a ráta model és a McCulloch-Pitts neuron. Túl a HH-modellen. Változatos feszültség- és ligandfüggő kinetikák, az egyrekezes modellek. Bursztölés: a börsztök típusai, példák a parabolikus és elliptikus börsztölésre. Az idegsejtek térbeli kiterjedésének következményei, a dendritek hatásai, a kábel-egyenlet. Szinapszis és plaszticitás. Részletes egyszerűsített kinetikai illetve fenomenológikus szinapszis modellek. A tanulás sejt szintű mechanizmusa: a szinaptikus plaszticitás. A Hebb-szabályon és variációi. Szinapszisok erősödése, gyengülése. Különböző időskálájú plaszticitás fajták. Metaplaszticitás. Neuronhálózatok modellezésének alapjai. A neuronhálózati dinamika két szintje. Tanulás-formák: tanítóval, megerősítéssel, tanító nélkül. Néhány alapvető neurohálózati architektúra: előre- és visszacsatolás, laterális kapcsolatok, attraktor hálózatok. Ablakok az agyra: tradicionális és modern mérési és adatelemzési eljárások, Idegi oszcillációk. Az oszcillációk keletkezése: sejt- és hálózatszintű mechanizmusok. Az oszcillációk funkciói: időzítés és dinamikai kapcsolás. Oszcillációk a memória-modellekben. A hippocampus. Memória és térbeli tájékozódás, modellezése külön-külön és egyszerre. Frekvencia- és időzítés kód. A hippocampus dinamikai módjai. Neurológiai és pszichiátriai rendellenességek modellezése. Epilepszia, Parkinson-kór, Alzheimer-kór, skizofrénia.

Kötelező irodalom*:

Az előadás jegyzetelt anyaga, kiadható/internetes vázlat

Ajánlott irodalom:

Spikes: exploring the neural code:

F. Rieke, D Warland, R. de Ruyter van Steveninck, W. Bialek, (1999)

Theoretical neuroscience:

Peter Dayan, L.F. Abbott, (2000)

Spiking Neuron Models,

Wulfram Gerstner and Werner M. Kistler (2002)

Mathematical Physiology,

James Keener and James Sneyd (1998)

Tantárgy neve: Intelligens nanoszerkezetű anyagok

Kredit: 2

Tantárgyfelelős neve/tanszéke: Varga Imre, Fizikai Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: Kémia BSc törzsanyaga fizikai és/vagy kolloid kémiából

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Az intelligens anyagok jellemzői és típusai. Előállításuk tömbfázisban ill. határrétegekben. Az intelligens anyagok fizikai-kémiája: Fenomenológikus termodinamikai modellek ill. molekuláris kölcsönhatási modellek. A méret (makro – nano átmenet hatása) illetve a felület hatása az intelligens anyagok tulajdonságaira. Biokompatibilis intelligens anyagok. Az intelligens anyagok potenciális alkalmazási területei.

Kötelező irodalom*:

Az előadás jegyzetelt anyaga, kiadható/internetes vázlat

Ajánlott irodalom:

Válogatott angolnyelvű összefoglalók ill. cikkek (internetről letölthetők).

Tantárgy neve: A kémia története

Kredit: 2+0

Tantárgyfelelős neve/tanszéke: Inzelt György, Fizikai Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: Kémia BSc alapozó tárgyai

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

A tárgy átfogó képet ad a kémiatörténet főbb korszakairól, e korszakok kiemelkedő tudósairól és azok munkásságáról, valamint a fejlődésben betöltött szerepükről. Megismertet a kémiatörténet szempontjából fontos, egymással szoros kapcsolatban levő elméleti-gyakorlati (tudományos-ipari) eredmények fejlődésével. Különös figyelmet szentel a magyar kémiatörténet kiemelkedő eseményeinek és tudósainak, valamint a kémiai Nobel-díjasok történetének.

Kötelező irodalom*: Balázs Lóránt: A kémia története I-II. Nemzeti Tankönyvkiadó, Budapest, 1996

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.

Ajánlott irodalom: A Természet Világa, az Élet és Tudomány és a KÖKÉL tudománytörténeti cikkei

A. Findlay, T. W. Williams: A kémia száz éve, Gondolat, 1969.

Ropolyi L. – Szegedi P. (szerk.) A tudományos gondolkodás története, ELTE Eötvös Kiadó, 2000.

Szabadváry F.: Az analitikai kémia módszereinek kialakulása, Akadémia Kiadó, Budapest, 1960.

Szabadváry F., Szőkefalvi Nagy Z.: A kémia története Magyarországon, Akadémia Kiadó, Budapest, 1972.

Id. Plinius: Természetrjz, Enciklopédia Kiadó, Budapest, 2002.

Tantárgy neve: Kémiai kommunikáció

Kredit: 2

Tantárgyfelelős neve/tanszéke: Tóth János, Fizikai Kémiai Tanszék, BMGE

Előtanulmányi feltételek: Kémia BSc törzsanyaga számítástechnikából

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Cél: a szakirodalom elsajátításának illetve a szóbeli és írásbeli kommunikáció módszereinek elsajátítása előadások meghallgatása és gyakorlati tevékenység elvégzése útján. Szó esik általában a kutatás eszközeiről is.

Mi a tudomány? Hogyan zajlik a tudományos kommunikáció? Milyen a jó kutató? Mit és hol kutassunk? Kísérletek tervezése és értékelése. Etikai kérdések. Irodalmazás, keresés a hálón. A tudományos közlés. Formális és informális kommunikáció. Konferenciák, pályázatok.

Kötelező irodalom*:

Az előadás jegyzetelt anyaga, kiadható/internetes vázlat

Ajánlott irodalom:

Csermely, P., Gergely, P., Koltay T., Tóth J.: Kutatás és közlés a természettudományokban, Osiris, 1999.

Beck M. könyvei.

Dévényi T.: Dr. Ezésez Géza karrierje, Gondolat, Budapest, 1975.

Gyurgyák J.: Szerkesztők és szerzők kézikönyve, Osiris, Budapest, 1996 és később.

Kuhn, Th. S.: A tudományos forradalmak szerkezete, Gondolat, Budapest, 1984.

Tantárgy neve: Kémiai informatikai gyakorlat A

Kredit: 0+4

Tantárgyfelelős neve/tanszéke: Turányi Tamás, Fizikai Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: Kémia BSc törzsanyaga fizikai kémiából

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

A gyakorlat feladata egy magas szintű programozási nyelv vagy programozási környezet felhasználásával (pl. Fortran, Pascal, C, C++, LabVIEW, MATLAB, Mathematica) kémiai probléma megoldása. Ez a kémiai probléma jellemzően a kísérleti adatok feldolgozása, a molekulamodellezés, elméleti kémia, reakciókinetika területére esik. A cél az irányított, de önálló munkán alapuló magas színvonalú feladatmegoldás.

Kötelező irodalom*: N/A

Ajánlott irodalom:

Az adott programozási nyelv vagy környezet kézikönyve vagy tankönyve.

A kémiai problémához kapcsolódó szakkönyvek.

Tantárgy neve: Kémiai informatikai gyakorlat B

Kredit: 0+4

Tantárgyfelelős neve/tanszéke: Turányi Tamás, Fizikai Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: Kémia BSc törzsanyaga fizikai kémiából

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

A gyakorlat feladata egy magas szintű programozási nyelv vagy programozási környezet felhasználásával (pl. Fortran, Pascal, C, C++, LabVIEW, MATLAB, Mathematica) kémiai probléma megoldása. Ez a kémiai probléma jellemzően a kísérleti adatok feldolgozása, a molekulamodellezés, elméleti kémia, reakciókinetika területére esik. A cél az irányított, de önálló munkán alapuló magas színvonalú feladatmegoldás.

Kötelező irodalom*: N/A

Ajánlott irodalom:

Az adott programozási nyelv vagy környezet kézikönyve vagy tankönyve.

A kémiai problémához kapcsolódó szakkönyvek.

Tantárgy neve: A kémiai kötés elmélete

Kredit:2

Tantárgyfelelős neve/tanszéke: Szalay Péter egyetemi tanár, Fizikai Kémiai Tsz.

Előtanulmányi feltételek: kémiai BSc törzsanyaga elméleti kémiából

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Az előadás során a hallgatók megismerkednek azokkal a kvalitatív fogalmakkal, amelyek a kvantummechanika elvei alapján használhatók a kémiai kötés fogalmának értelmezésére.

Kötelező irodalom*:

Az előadás jegyzetelt anyaga, kiadható/internetes vázlat

Ajánlott irodalom:

Tantárgy neve: Kinetikai egyenletek analitikus és numerikus megoldásai

Kredit: 0+2

Tantárgyfelelős neve/tanszéke: Lagzi István László, Fizikai Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: Kémia BSc törzsanyaga fizikai kémiából és matematikából

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Közönséges differenciálegyenletek; egzisztencia- és unicitás tételek; kezdeti feltételek; fázistér; stacionárius pontok. Kémiai kinetikai egyenletek; közönséges differenciálegyenlet-rendszerek; analitikus módszerek: változóikban szétválasztható egyenletek, a konstans-variálás módszere. n -ed rendű reakciók, konszekutív bomlások, egyensúlyi reakciók, előegyensúlyok, autokatalitikus reakciók, oszcilláló reakciók. Kémiai mechanizmusok egzakt analitikus tárgyalása; megoldások viselkedése $f \rightarrow \infty$ esetekben. Numerikus módszerek alapjai; a módszerek stabilitása, konvergenciája.

Kötelező irodalom*:

Az előadás jegyzetelt anyaga, kiadható/internetes vázlat

Ajánlott irodalom:

1. Nemlineáris dinamika és egzotikus kinetikai jelenségek kémiai rendszerekben G. Bazsa szerk., Debrecen-Budapest-Gödöllő (1992).
2. Scott, S. K. Oscillations, Waves and Chaos in Chemical Kinetics, Oxford University Press, Oxford, (1995).
3. Epstein, I. R.; Pojman, J. A. An Introduction to Nonlinear Chemical Dynamics, Oxford University Press, New York, (1998).

Tantárgy neve: **Kolloidális gyógyszerhordozók stabilitása**

Tantárgy kreditértéke: 2 +0

Tantárgyfelelős neve/tanszéke: Dr. Csemesz Ferenc, Fizikai Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: Kémia BSc törzsanyaga fizikai kémiából és kolloidikából

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Kolloid részecskék, kolloid rendszerek képződésének és megszűnésének alapelvei. Kolloidok diszperz és kohezív rendszerei, nano-szerkezetek élő szervezetekben, Kolloidstabilitás gyógyszerészeti rendszerekben. Kolloidok felhasználása diszpergált részecskék felületi és elektrokinetikai sajátságainak, gyógyszerészeti diszperziók kinetikai állandóságának, és reológiai tulajdonságainak szabályozására.

Kötelező irodalom:

Rohrsetzer S.: Kolloidika (egyetemi tankönyv), választott részek,
Tankönyvkiadó, Budapest, 1991

Rácz I., Selmeczi B.: Gyógyszer technológia I-III (egyetemi tankönyv), választott részek,
Medicina, Budapest, 2001

Ajánlott irodalom:

J. Kreuter: Colloidal Drug Delivery Systems, Marcel Dekker Inc., New York, 1994

R. H. Müller: Colloidal Carriers for Controlled Drug Delivery and Targeting,
Wissenschaftliche Verlagsgesellschaft mbH, Stuttgart, 1991

Tantárgy neve: **Kolloidális gyógyszerhordozók stabilitása**

Tantárgy kreditértéke: 2 +0

Tantárgyfelelős neve/tanszéke: Dr. Csempesz Ferenc, Fizikai Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: Kémia BSc törzsanyaga fizikai kémiából és kolloidikából

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Kolloid részecskék, kolloid rendszerek képződésének és megszűnésének alapelvei. Kolloidok diszperz és kohezív rendszerei, nano-szerkezetek élő szervezetekben, Kolloidstabilitás gyógyszerészeti rendszerekben. Kolloidok felhasználása diszpergált részecskék felületi és elektrokinetikai sajátságainak, gyógyszerészeti diszperziók kinetikai állandóságának, és reológiai tulajdonságainak szabályozására.

Kötelező irodalom:

Rohrsetzer S.: Kolloidika (egyetemi tankönyv), választott részek,
Tankönyvkiadó, Budapest, 1991

Rácz I., Selmeczi B.: Gyógyszer technológia I-III (egyetemi tankönyv), választott részek,
Medicina, Budapest, 2001

Ajánlott irodalom:

J. Kreuter: Colloidal Drug Delivery Systems, Marcel Dekker Inc., New York, 1994

R. H. Müller: Colloidal Carriers for Controlled Drug Delivery and Targeting,
Wissenschaftliche Verlagsgesellschaft mbH, Stuttgart, 1991

Tantárgy neve: **A kolloidika alkalmazásai**

KV6KL4

Tantárgy kreditértéke: 1 + 3

Tantárgyfelelős neve/tanszéke: Dr. Csempesz Ferenc, Fizikai Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: Kémia BSc törzsanyaga fizikai kémiából és kolloidikából

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Kolloid részecskék, kolloid rendszerek képződésének és megszűnésének alapelvei. Kolloidok diszperz és kohezív rendszerei, nano-szerkezetek az élő és élettelen természetben, orvos-biológiai, gyógyszerészeti, mezőgazdasági, ipari (élelmiszer, festék, papír, kozmetikai stb.) és környezetvédelmi alkalmazásokban. Kolloidok felhasználása és kolloidfizikai/kémiai módszerek alkalmazása határfelületi sajátságok, kinetikai állandóság, elektrokinetikai - és transzportfolyamatok, valamint reológiai tulajdonságok szabályozására.

Kötelező irodalom:

Wolfram E.: Kolloidika (egyetemi jegyzet), II/2 és I-III választott részek,
Tankönyvkiadó, Budapest, 1977
Rohrsetzer S.: Kolloidika (egyetemi tankönyv), választott részek,
Tankönyvkiadó, Budapest, 1991

Ajánlott irodalom:

Gábor M.: Az Élelmiszer előállítás kolloidikai alapjai, Mezőgazdasági Kiadó, Budapest 1987
J. Kreuter: Colloidal Drug Delivery Systems, Marcel Dekker Inc., New York, 1994
K. Holmberg: Handbook of Applied Surface and Colloid Chemistry, Vol.:1,2,
Wiley&Sons, England, 2001. ISBN 0-471-49083-0

Tantárgy neve: Kvantumkémia Szeminárium A

Kredit: 2

Tantárgyfelelős neve/tanszéke: Surján Péter Fizikai Kémia

Előtanulmányi feltételek: Kvanummechanika, Elméleti Kémia

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

A szeminárium során a hallgatók a kvantumkémia klasszikussá vált publikációit olvassák el eredeti (angol) nyelven, ezeket ismertetik, és az oktató vezetésével diszkutálják.

Kötelező irodalom*: az előadáson kiosztott segédanyag

Ajánlott irodalom:

Tantárgy neve: Kvantumkémia Szeminárium B

Kredit: 2

Tantárgyfelelős neve/tanszéke: Szalay Péter, Fizikai Kémia Tanszék

Előtanulmányi feltételek: Kvantummechanika, Elméleti Kémia

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

A szeminárium során a hallgatók a kvantumkémia klasszikussá vált publikációit olvassák el eredeti (angol) nyelven, ezeket ismertetik, és az oktató vezetésével diszkutálják.

Kötelező irodalom*: az előadáson kiosztott segédanyag

Ajánlott irodalom:

Tantárgy neve: A lángok kémiája és fizikája

Kredit: 2+0

Tantárgyfelelős neve/tanszéke: Turányi Tamás, Fizikai Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: Kémia BSc törzsanyaga fizikai kémiából

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

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

Tantárgy neve: Makromolekulák és amfipatikus anyagok közötti kölcsönhatás oldatokban és határfelületeken

Kredit: 2

Tantárgyfelelős neve/tanszéke: Mészáros Róbert, Fizikai Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: Kémia BSc törzsanyaga fizikai és/vagy kolloid kémiából

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Semleges makromolekulák és amfipatikus anyagok kölcsönhatása

Tenzid aggregátumok önszerveződésének különböző szintjei. Polimer/tenzid komplexek képződésének leírása termodinamikai modellekkel. A makromolekula/tenzid komplexek jellegének függése a polimer szerkezetétől, méretétől és anyagi minőségétől valamint a tenzid koncentrációjától.

Makromolekulákból és tenzidekből képződő határfelületi rétegek

Polimerek és tenzidek oldataiból képződő adszorpciós rétegek. Polimerrel borított szilárd felületek módosítása tenzid oldatok hatására. A szilárd/vizes oldat határfelületeken képződő makromolekula/tenzid komplexek struktúrájának kapcsolata az oldatfázisban képződő polimer/tenzid aggregátumok szerkezetével.

Kötelező irodalom*:

Az előadás jegyzetelt anyaga, kiadható/internetes vázlat

Ajánlott irodalom:

1. Goddard, E. D.: *Interactions of Surfactants with Polymers and Proteins*; Ananthapadmanabhan, K. P., Eds.; CRC Press: Boca Raton, FL, 1993
2. Kwak, J.C.T. *Polymer-Surfactant Systems*; Surfactant Sci. Ser.; Marcel Dekker: New York, 1998
3. Holmberg K., Jönsson B., Kronberg B., Lindman B.: *Surfactants and Polymers in Aqueous Solution* John Wiley & Sons; 2.ed., 2002
4. Hansson, P.; Lindman, B.: "Surfactant-polymer interactions" *Current. Opinion in Colloid and Interface Science* 1, 604-613, 1996
5. Mészáros R, Varga I., Gilányi T.: *Effect of Polymer Molecular Weight on the Polymer/Surfactant Interaction* *J. Phys. Chem. B.* 2005, 109, 13538-13544

Tantárgy neve: **Makromolekulák határfelületi viselkedése**

Kwn9551

Tantárgy kreditértéke: 2 +0

Tantárgyfelelős neve/tanszéke: Dr. Csemesz Ferenc, Fizikai Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: Kémia BSc törzsanyaga fizikai kémiából és kolloidikából

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Makromolekulás oldatok. Makromolekulák határfelületi felhalmozódása: termodinamikai hajtóerő, az adszorpció kinetikája. Egyensúlyi adszorpció: határfelületi többletek, adszorpciós izotermák. A polimer adszorpció elméletei. Határfelületi polimerrétegek szerkezete, adszorbeált makromolekulák konformációja, szterikus kölcsönhatásai. Makromolekulák kompetitív adszorpciója. Elegyadszorpciós izotermák, a preferenciális adszorpció jellemzése.

Kötelező irodalom:

Wolfram E.: Kolloidika (egyetemi jegyzet), II/2 és I-III választott részek,
Tankönyvkiadó, Budapest, 1977

Rohrsetzer S.: Kolloidika (egyetemi tankönyv), választott részek,
Tankönyvkiadó, Budapest, 1991

Ajánlott irodalom:

G.J. Fleer et al.: Polymers at Interfaces, Chapman & Hall, London, 1993.

Bárány S.: Polimerek diszperz rendszerekben, Akadémiai Kiadó, Budapest, 2000.

Tantárgy neve: Másodkvantált formalizmus

Kredit: 2+0

Tantárgyfelelős neve/tanszéke: Surján Péter, Fizikai Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: Kémia BSc törzsanyaga fizikai és elméleti kémiából

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

A sokelektronelmélet modern megfogalmazása: vákumállapot, elektronok keltése és eltüntetése. A Pauli elv algebrai megjelenítése. Betöltési számok. Operátorok. Mátrixelem-számolási szabályok. Sűrűségmátrixok. Alkalmazások: az elektronkorreláció perturbatív elmélete, intermolekuláris kölcsönhatások. A kémiai kötés, mint kvázirészecske.

Kötelező irodalom*:

Az előadás jegyzetelt anyaga, kiadható/internetes vázlat

Ajánlott irodalom:

P. R. Surján: Second Quantized Approach to Quantum Chemistry, Springer, Heidelberg, 1989

Tantárgy neve: Metastabil folyadékok

Kredit: 2

Tantárgyfelelős neve/tanszéke: Imre Attila, KFKI Atomenergia Kutatóintézet

Előtanulmányi feltételek: Kémia BSc törzsanyaga fizikai kémiából

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

- A metastabilitás termodinamikai és statisztikus fizikai alapjai, stabilitási határok.
- Folyadékok fizikai kémiája negatív nyomáson.
- Kísérleti technikák ismertetése.
- Negatív nyomású folyadékok a biológiában és a földtudományokban.
- Túlhűtött anyagok, üvegek.

Kötelező irodalom*:

Az előadás jegyzetelt anyaga

Ajánlott irodalom:

- P.G. Debenedetti: Metastable Liquids: Concepts and Principles, Princeton University Press, Princeton, NJ, 1996
- A. Imre, K. Martinás and L.P.N. Rebelo: Thermodynamics of Negative Pressures in Liquids, Journal of Non-Equilibrium Thermodynamics, vol.23, pp351-375, 1998
- Liquids Under Negative Pressure (Eds.: A.R. Imre, H.J. Maris and P.R. Williams) NATO Science Series, Kluwer, Dordrecht, 2002

Tantárgy neve: Modern felületvizsgáló módszerek az elektrokémiában

Kredit: 2+2

Tantárgyfelelős neve/tanszéke: Nagy Gábor, Fizikai Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: Kémia BSc törzsanyaga fizikai és elméleti kémiából

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

A tantárgy célja a fémek és elektrolitoldatok közötti határfelületek lokális tulajdonságainak vizsgálatára alkalmas modern mérési módszerek megismertetése.

A tantárgy keretein belül bemutatásra kerül a pásztázó alagútmikroszkópia, atomerő-mikroszkópia, infravörös spektroszkópián alapuló módszerek, optikai felharmonikus generálásán alapuló módszerek, szinkrotron röntgen diffrakciós méréstechnika, valamint néhány más pásztázó felületvizsgáló eljárás is.

A módszerek bemutatása az elméleti alapokon és a megvalósítási lehetőségeken túl a legérdekesebb példákon keresztül történik.

Kötelező irodalom*:

Az előadás jegyzetelt anyaga

Ajánlott irodalom:

Inzelt György: Az elektrokémia korszerű elmélete és módszerei

P.W. Atkins: Fizikai kémia

H.D. Abruna: Electrochemical Interfaces, VCH 1991

Tantárgy neve: Molekulaforgások kvantummechanikája

Kredit: 2

Tantárgyfelelős neve/tanszéke: Császár Attila, Fizikai Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: Kémia BSc törzsanyaga fizikai és elméleti kémiából

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Impulzus momentum algebra; a forgás csoportelmélete; Euler-szögek és iránykoszinuszok; impulzuszórák csatolása; Clebsch-Gordan koefficiensek; forgatási mátrixok; Wigner-mátrixok; merev rotátor energiaszintjei és hullámfüggvényei; kiválasztási szabályok; eltérések a merev rotátor modelltől; ab initio forgási spektroszkópia.

Kötelező irodalom*

- (1) Török Ferenc (Szerk.): A kémiai szerkezetvizsgáló módszerek elmélete, ELTE TTK jegyzet: 1974.
- (2) Kapuy Ede, Török Ferenc: Az atomok és molekulák kvantumelmélete, Akadémiai Kiadó: Budapest, 1975.
- (3) Császár Attila: Előadási fóliák (fénymásolat, ELTE TTK KTCS könyvtár).

Ajánlott irodalom:

- (1) Harry W. Kroto: *Molecular Rotation Spectra*, Wiley: London, 1975.
- (2) Richard N. Zare: *Angular Momentum: Understanding Spatial Aspects in Chemistry and Physics*, Wiley-Interscience: New York, 1988.
- (3) P. R. Bunker and P. Jensen, *Molecular Symmetry and Spectroscopy*, 2nd edition, NRC Research Press: Ottawa, 1998.

Tantárgy neve: Molekulaspektrumok és fotokémiai reakciók elméleti vizsgálata

Kredit:2

Tantárgyfelelős neve/tanszéke: Szalay Péter egyetemi tanár, Fizikai Kémiai Tsz.

Előtanulmányi feltételek: Molekulák elektronszerkezete

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Az előadás során a hallgatók megismerkedhetnek azokkal az elméleti módszerekkel, amelyek alkalmasak a molekulák atommagjai mozgásának leírására. E dinamikai eljárások azon ágaira koncentrálnunk, amelyekkel gerjesztési spektrumok illetve fotokémiai reakciók írhatók le.

Kötelező irodalom*:

Az előadás jegyzetelt anyaga, kiadható/internetes vázlat

Reinhard Schinke: Photodissociation Dynamics, Cambridge University Press, 1993

Ajánlott irodalom:

Tantárgy neve: Molekularezgések kvantummechanikája

Kredit: 2

Tantárgyfelelős neve/tanszéke: Császár Attila, Fizikai Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: Kémia BSc törzsanyaga fizikai és elméleti kémiából

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Az elektron- és magmozgások szétválasztása: a Born–Oppenheimer és az adiabatikus közelítés. A rezgő és forgó mozgás szétválasztása: az Eckart feltételek. Az 1-D harmonikus lineáris oszcillátor megoldása hagyományos módon és léptető operátorokkal. Harmonikus oszcillátor függvények mátrixelemei. Anharmonikus oszcillátor egy dimenzióban (perturbációszámítás). Harmonikus rezgési analízis N -atomos molekulákra. Normálrezgések. A GF módszer. Az SQM módszer. Rezgési perturbációszámítás. Van Vleck transzformáció. Energiaformulák. Rezonanciák. A rezgési-forgási probléma variációs megoldása. Koordináta rendszerek. A kinetikus energia operátor általános alakja különböző koordináta rendszerekben. Potenciális energia hiperfelületek és *ab initio* számításuk. Mátrixelemek hatékony számítása. A DVR technika. Diagonalizáló eljárások. Normálrezgések és lokális rezgések. *Ab initio* rezgési-forgási spektroszkópia.

Kötelező irodalom*

- (1) Török Ferenc (Szerk.): A kémiai szerkezetvizsgáló módszerek elmélete, ELTE TTK jegyzet: 1974.
- (2) Kapuy Ede, Török Ferenc: Az atomok és molekulák kvantumelmélete, Akadémiai Kiadó: Budapest, 1975.
- (3) Császár Attila: Előadási fóliák (fénymásolat, ELTE TTK KTCS könyvtár).

Ajánlott irodalom:

- (1) Phil R. Bunker and Per Jensen, *Molecular Symmetry and Spectroscopy*, 2nd edition, NRC Research Press: Ottawa, 1998.
- (2) Ira N. Levine: *Molecular Spectroscopy*, Wiley-Interscience: New York, 1975.
- (3) E. B. Wilson, Jr., J. C. Decius, and P. C. Cross, *Molecular Vibrations: The Theory of Infrared and Raman Vibrational Spectra*, Dover: New York, 1980.

Tantárgy neve: A Monte Carlo szimulációs módszer és határfelületi alkalmazásai

Kredit: 2

Tantárgyfelelős neve/tanszéke: Jedlovszky Pál

Előtanulmányi feltételek: Kémia BSc törzsanyaga fizikai és elméleti és kolloid kémiából

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

A Monte Carlo módszer alapjai; Boltzmann eloszlás; Metropolis mintavétel; Monte Carlo szimuláció izoterm-izobár és nagykanonikus sokaságon; fázisegyensúlyok szimulációja, a Gibbs Monte Carlo módszer; potenciálfüggvények és párkorrelációs függvények; molekuláris rendszerek szimulációjának kérdései; a molekulák polarizációjának számítása a szimuláció során; Monte Carlo szimulációk irányított mintavételezéssel; Monte Carlo szimulációk kísérleti adatok alapján, a fordított (Reverse) Monte Carlo (RMC) módszer; szabadenergiaszámítás Monte Carlo módszerrel

Kötelező irodalom*:

Az előadás jegyzetelt anyaga, kiadható/internetes vázlat

Ajánlott irodalom:

M. P. Allen, D. J. Tildesley, Computer simulation of liquids

D. Frenkel, B. Smit, Understanding molecular simulations

A. Leach, Molecular modelling

Tantárgy neve: Pásztázó képalkotó módszerek az anyagtudományban

Kredit: 2

tantárgyfelelős neve/tanszéke: Nagy Péter

Előtanulmányi feltételek: -

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Mikroszkóptípusok, optikai képalkotó és pásztázó technikák összehasonlítása. Pásztázó mikroszkópok története, felépítése, fejlődése. Pásztázó elektronmikroszkóp, - Konfokális mikroszkóp, - Planaris alagútspektroszkópia, - Topographiner, - Pásztázó alagútmikroszkóp, - Pásztázó tűszondás mikroszkópok működése, sajátosságai. Alagútspektroszkópia, és alkalmazásai. Az atomi erőmikroszkóp működése, sajátosságai. Az AFM különböző képalkotási módusai, alkalmazások. Mágneses erő mikroszkóp és alkalmazásai. Pásztázó optikai közeltér mikroszkóp és alkalmazásai. Más pásztázó mikroszkópok, képrekonstrukció. Pásztázó mikroszkópok elektrokémiai alkalmazásai. Különleges alkalmazások, kereskedelemben kapható eszközök
Nanoindentáció, scratching, és más mechanikai alkalmazások - Biológiai, biofizikai és egyéb alkalmazások, - Jelentősebb SPM gyártók, - az eszközök jellegzetességei

Kötelező irodalom*:

Bertóti-Marosi-Tóth (szerk.): Műszaki felülettudomány és orvosbiológiai alkalmazásai (SEM és SPM fejezetek)

Ajánlott irodalom:

Tantárgy neve: Polielektrolitokat és tenzideket tartalmazó rendszerek gyakorlati alkalmazásai

Kredit: 2

Tantárgyfelelős neve/tanszéke: Mészáros Róbert, Fizikai Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: Kémia BSc törzsanyaga fizikai és/vagy kolloid kémiából

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Polielektrolit tenzid kölcsönhatás

A polielektrolit/tenzid kölcsönhatás mechanizmusa és a tenzid kötődés kooperativitása. Biomakromolekulák és tenzidek kölcsönhatása és ennek élettani hatásai.

Polielektrolit/tenzid elegyek fázisulajdonságai.

Ellentétesen töltött makromolekulákat és tenzideket (vizes közegben) tartalmazó rendszerek fázisdiagramjai illetve azok helyes reprezentációja.

Ipari alkalmazások.

A polielektrolit/tenzid elegyek határfelületi viselkedésének szerepe új kozmetikai és háztartási termékek kidolgozásában.

Kötelező irodalom*:

Az előadás jegyzetelt anyaga, kiadható/internetes vázlat

Ajánlott irodalom:

1. Claesson P.M, Dedinaite A., Mészáros R., Varga I.: *Association between polyelectrolytes and oppositely charged surfactants in bulk and at solid/liquid interfaces*, Colloid Stability and Application in Pharmacy: Volume 3, Editor Tharwat Tadros, Wiley, 2007 ISBN: 978-3-527-31463-8
2. Radeva, T.: *Physical Chemistry of Polyelectrolytes*, In Surfactant Science Series;. Marcell Dekker Inc.: New York, 2001
3. Wei, Y.C.; Hudson, S.M : *The interaction between polyelectrolytes and surfactants of opposite charge* J. Macromol. Sci. Rev. Macromol. Chem. Phys. C35, 15, 1995
4. Mészáros R., Thompson L., Bos M., Varga I., Gilányi T.: *Interaction of sodium dodecyl sulfate with polyethyleneimine: Surfactant induced polymer solution colloid dispersion transition* Langmuir 19, 609-615, 2003

Tantárgy neve: Reakció-diffúzió rendszerek és modellezésük

Kredit: 2+0

Tantárgyfelelős neve/tanszéke: Lagzi István László, Fizikai Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: Kémia BSc törzsanyaga fizikai kémiából és matematikából

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Kémiai reakciók; közönséges differenciálegyenletek és megoldásuk (analitikus és numerikus módszerek). Fázistér; stacionárius pontok; lineáris stabilitásvizsgálat. Diffúziós egyenletek; advekciós egyenletek; parciális differenciálegyenletek; kezdeti- és határfeltételek. Parciális differenciálegyenletek analitikus megoldási módszerei. Parciális differenciálegyenletek numerikus megoldási módszerei; „method of lines”; térbeli diszkretizáció, időbeli integrálás. Véges elem módszerek (FEM). Kémiai mintázatok: BZ hullámok, autokatalitikus frontok, FDO-, Turing és Liesegang mintázatok. Sztochasztikus modellek; átmeneti valószínűség; Monte-Carlo szimulációk. Komplex rendszerek: reakció-diffúzió-advekció; modellezési eljárások; alkalmazás: légkörkémiái terjedési modellek.

Kötelező irodalom*:

Az előadás jegyzetelt anyaga, kiadható/internetes vázlat

Ajánlott irodalom:

1. Nemlineáris dinamika és egzotikus kinetikai jelenségek kémiai rendszerekben G. Bazsa szerk., Debrecen-Budapest-Gödöllő (1992).
2. Scott, S. K. Oscillations, Waves and Chaos in Chemical Kinetics, Oxford University Press, Oxford, (1995).
3. Epstein, I. R.; Pojman, J. A. An Introduction to Nonlinear Chemical Dynamics, Oxford University Press, New York, (1998).

Tantárgy neve: Reakciómechanizmusok vizsgálata

Kredit: 2+0

Tantárgyfelelős neve/tanszéke: Turányi Tamás, Fizikai Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: Kémia BSc törzsanyaga fizikai kémiából

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Reakciómechanizmusok kifejtése: reakciómechanizmusok előállítása kézzel és számítógépi programmal, az automatikus reakciómechanizmus előállítás módszerei; lokális és globális érzékenységanalízis módszerek, az érzékenységi együtthatók értelmezése; az érzékenységanalízis alkalmazásai; reakciómechanizmusok redukciója: a mechanizmusredukció céljai, anyagfajták és felesleges reakciók elhagyása mechanizmusból; időskála analízis: a kvázistacionárius közelítés (QSSA) története, lényege, hibájának számítása, a lassú sokaságok (ILDM) elmélete és alkalmazása a reakciókinetikában.

Kötelező irodalom*:

Az előadás jegyzetelt anyaga, kiadható/internetes vázlat

Ajánlott irodalom:

Turányi Tamás és Györgyi László

Összetett reakciómechanizmusok vizsgálata érzékenységanalízissel

Fejezet a "Nemlineáris dinamika és egzotikus kinetikai jelenségek kémiai rendszerekben" c. egyetemi jegyzetben (szerk. Bazsa György, Debrecen-Budapest-Gödöllő, 1992)

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)

Tantárgy neve: Reakciómechanizmusok felderítése elméleti módszerekkel

Kredit: 2

Tantárgyfelelős neve/tanszéke: Stirling András , Kémiai Kutatóközpont

Előtanulmányi feltételek: Kémia BSc törzsanyaga fizikai és elméleti kémiából

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

- Kinetika, átmeneti állapot, reakciókoordináta. Kísérleti módszerek, kísérletből kinyerhető információk, adatok, reakciókoordináta
- Mozgás a potenciális energia felületen: koncepció, kvantumkémiai eljárások, kémiai jelentőséggel rendelkező tartományok. Átmeneti állapot keresési módszerek (sajátvektor követés, RFO, NEB, IRC, stb.). Információ az entrópiaváltozásról. Born-Oppenheimer közelítés alkalmazhatósága, és korlátai a reaktivitás leírása szempontjából. Felületkereszteződés.
- Mozgás a szabadenergia felületen: koncepció, sokaság, alkalmazható kvantumkémiai módszerek. Ab initio MD módszerek. Átmeneti állapot keresés nem-nulla hőmérsékleten: hisztogram módszer, termodinamikai integrálás, kék-hold mintavételezés, reaktív-út mintavételezés, metadinamika, egyéb ún. ritka-eseményt kereső algoritmus.

Kötelező irodalom*:

Az előadás jegyzetelt anyaga, és a minden egyes alkalomra biztosított egy-egy tudományos közlemény

Ajánlott irodalom:

Frank Jensen: Introduction to Computational Chemistry, Wiley, 1999.

Tantárgy neve: Rendezetlenség kondenzált fázisokban

Kredit: 2

Tantárgyfelelős neve/tanszéke: Pusztai László, MTA SZFKI/Fizikai Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: Kémia BSc törzsanyaga fizikai és elméleti kémiából

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Az előadások a folyadék és (amorf és kristályos) szilárd halmazállapotokban megjelenő szerkezeti rendezetlenség jellemzésére alkalmas mennyiségeket, valamint ezek – elsősorban kísérleti – meghatározásának módszereit öleli fel.

A szerkezeti függvény és a párkorrelációs függvény. Magasabb rendű korrelációk.

A szerkezeti függvény meghatározása diffrakciós módszerekkel.

A röntgen-abszorpción alapuló kísérleti módszerek.

Számítógépes (molekuladinamikai és Monte Carlo) szimulációk. A szerkezet 'direkt' (azaz közvetlenül a kísérleti adatokon alapuló) modellezésére alkalmas számítógépes eljárások.

Folyadékok szerkezete. Amorf fémötvözetek és kovalens üvegek szerkezete. Rendezetlenség kristályokban.

Kötelező irodalom*:

Az előadás jegyzetelt anyaga, kiadható/internetes vázlat

Ajánlott irodalom:

Kémia újabb eredményei 80. kötet, Akadémiai, 1995.

M.T. Dove: Structure and Dynamics (Oxford University Press, 2003)

V.M. Niels, D.A. Keen: Diffuse neutron scattering from crystalline materials (Clarendon Press, Oxford, 2001)

Tantárgy neve: Statisztikus Mechanika 2

Kredit: 2

Tantárgyfelelős neve/tanszéke: Baranyai András, Fizikai Kémia

Előtanulmányi feltételek: Statisztikus Mechanika I

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Opcionális fejezetek a statisztikus mechanikának az alapozásán túlmenő részeiből (folyadékok integrálegyenletes elméletei, transzportfolyamatok mikroszkopikus származtatása, felületek statisztikus mechanikája, elektrolit elméletek, stb.)

Kötelező irodalom*: Baranyai A., Schiller R., Statisztikus mechanika vegyészeknek (Akadémiai, 2003)

Ajánlott irodalom:

Tantárgy neve: Számítógépes mérés technika

Kredit: 0+2

Tantárgyfelelős neve/tanszéke: Keszei Ernő, Fizikai Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: Kémia BSc törzsanyaga fizikai kémiából

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Kísérletek, mérések. Műszeres mérések. Folyamatirányítás. A számítógép működési modellje és kapcsolata a külvilággal. Számítógépes mérőrendszerek moduláris felépítése. Az i8255 interface mérés technikai alkalmazása. Az USB-, a printer- és a soros portok mérés technikai alkalmazása (önálló adatgyűjtési feladatok). Analóg/digitális (A/D) és D/A konverterek. Az érzékelők működési elvei, átviteli függvény meghatározása. Nem elektromos mennyiségek mérése elektromos jelet szolgáltató mérőátalakítóval. Számítógépes mérés technika (esettanulmányok). Egyszerű mérésvezérlő program írása.

Kötelező irodalom*:

„Bevezetés a számítógépes mérés technikába” (méréselméleti, informatikai és elektronikai alapokkal) ELTE jegyzet tervezett megjelenés 2008

Az előadás jegyzetelt anyaga

Ajánlott irodalom:

R. P. Wayne: Chemical Instrumentation, Oxford University Press: 1994.

R. W. Cattral: Chemical Sensors, Oxford University Press: 1997.

Szalma J., Láng Gy., Péter L.: Alapvető fizikai kémiai mérések és a kísérleti adatok feldolgozása

ELTE jegyzet 2007

Tantárgy neve: Tenzidek önszerveződése oldatban.

Kredit: 2+0

Tantárgyfelelős neve/tanszéke: Gilányi Tibor, Fizikai Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: Kémia BSc törzsanyaga kolloidika és felületkémiából

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

A tenzidoldatok fizikai-kémiai tulajdonságai. A "hidrofób kölcsönhatás", az amfipatikus szerkezetű molekulák önszerveződésének hajtóereje.

A micellaképződés klasszikus elméletei. Tömeghatás modell. Pszeudo-fázisszeparációs 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 szennyvezetéses módszer. A sztatikus és dinamikus fényszóródás alkalmazása.

Kötelező irodalom*:

Az előadás jegyzetelt anyaga.

Ajánlott irodalom:

R. J. Hunter: Foundation of Colloid Science, Clarendon Press, Oxford, 1993.

Tantárgy neve: Tömegspektrometria: Tömegspektrométerek működése.

Kredit: 2

Tantárgyfelelős neve/tanszéke: Dr. Bencze László, Fizikai Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: Kémia BSc törzsanyaga fizikai-kémiából, fizikából és matematikából.

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

A tömegspektrometria története. A tömegspektrométerek felépítése. Ionforrások egyes típusai. A tömegspektrométer-analizátorok típusai. Irány-, sebesség- és kettős fókuszálás. Pásztázási módszerek. Kapcsolt pásztázások és alkalmazásaik a szerkezetkutatásban. Detektorok. A tömegspektrométer vákuumrendszere. Mintabeeresztő rendszerek.

Kötelező irodalom*:

Az előadás anyaga írásvetítő fóliákban.

Ajánlott irodalom:

Kaposi Olivér: Tömegspektrometria I., Tankönyvkiadó, Budapest, 1989.

A kémia újabb eredményei 45. kötet, Akadémiai Kiadó, Budapest, 1979.

Cornides István: Gyakorlati tömegspektroszkópia, Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1970.

Simonyi Károly: Elektronfizika.

Kelman-Javor: Elektronoptika, Akadémiai Kiadó, Budapest, 1965 (magyar fordítás).

Tantárgy neve: Az XPS alapjai és felületkémiai vonatkozásai

Kredit: 2

Tantárgyfelelős neve/tanszéke: Kiss Éva, Fizikai Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: Kolloidkémia, fizikai kémia

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

A felületanalízis általános kérdései. A röntgensugár-fotoelektron-spektroszkópia, mint felületanalitikai módszer. A módszer elve, a berendezés felépítése. Mérési körülmények és minta-előkészítés. A felületi réteg kémiai összetételének és kémiai szerkezetének meghatározása. Minőségi és mennyiségi elemzés, mélységprofil-mérés roncsoló és nem roncsoló módszerrel.

Alkalmazási példák: szervetlen és szerves rendszerek, felületi borítottság és rétegvastagság meghatározás különböző modellek esetén.

Mérési és méréskiértékelési gyakorlat.

Kötelező irodalom*:

B.W. Rossiter, R.C. Baetzold (Eds.) Physical Methods of Chemistry, vol IXB Investigations of surfaces and Interfaces, Wiley, N. Y. 1993.

Bertóti Imre: A felületvizsgálat korszerű módszerei. p.120.

Műszaki felülettudomány és orvosi biológiai alkalmazásai. (Szerk: Bertóti Imre, Marosi György, Tóth András) B+V Kiadó, Budapest, 2003. pp 260-277

Ajánlott irodalom: