

Szakmai törzstárgyak

Analitikai Kémia

Tantárgy neve: Az analitikai kémia alkalmazásai

Kredit: 2

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: 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: Anyagszerkezet-vizsgálati módszerek II: szupramolekuláris mérettartomány

Kredit: 2

Tantárgyfelelős: Sinkó Katalin

A tantárgyfelelős tanszéke: Analitikai Kémia Tanszék

Előtanulmányi feltételek: Műszeres analitikai kémia, fizikai kémia

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Anyagszerkezet-vizsgálati módszerek szupramolekuláris, nanométeres tartományban

Fényszórás (sztatikus fényszóródás elmélete, részecsketömeg, inerciasugár, részecskealak és a második viriálegyüttható meghatározása, dinamikus fényszóródás elmélete, részecskék diffúziós állandójának és méretének meghatározása); **Röntgen- és neutronszórás** (amorf anyagok szupramolekuláris szerkezetvizsgálata kis- és nagyszögű röntgen- és neutronszórással, röntgen- és neutronszórás elvi alapjai, összehasonlítása, szórási képek kiértékelése, amorf és rendezett szerkezetek SAXS, SANS vizsgálata); **Elektron- és neutron diffrakció** (elméleti alapok, alkalmazási lehetőségek).

Morfológiai és felületvizsgálati módszerek

Elektronmikroszkópia (pásztázó és transzmissziós EM elméleti alapjai, működése elvei); **Pásztázó tűszondás módszerek, AFM, STM** (szilárd felületek morfológiája, kompozit anyagok fázis szerkezete, rugalmassági modulus meghatározása, erő-spektroszkópia, szilárd-folyadék határfelületek vizsgálata); **Felület analítika, XPS** (nanorétegek atomi összetétele, kémiai szerkezete, mélységprofil analízis); **Reflexiós optikai módszerek, ellipszometria, reflektometria, OWLS, SPR, közvetlen erőmérés** (módszerek elméleti optikai alapjai, rétegvastagság, molekulaorientáció, mikroszerkezet, kristályosság és érdesség meghatározás, szenzorikai alkalmazások)

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: Elválasztástechnika

Kredit: 2

Tantárgyfelelős: Dr Torkos Kornél, egy. docens

A tantárgyfelelős tanszéke: Analitikai Kémia

Előtanulmányi feltételek: a vegyész MSc belépési követelményei, alapvető analitikai és fizikai-kémiai ismeretek. Kémia BSc elválasztástechnika ea. és labor teljesítése.

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása: speciális detektálási technikák a gáz és folyadékkromatográfiában, alkalmazási példák a környezet, élelmiszer és gyógyszeranalitika területéről. Mintaelőkészítési mintakezelési eljárások. Csatolt technikák (GC-MS, HPLC- MS).

Kötelező irodalom*: Kremmer-Torkos-Szókán: Elválasztástechnika elmélete és gyakorlata
Eötvös Kiadó 2005

Ajánlott irodalom:

Tantárgy neve: Elválasztástechnika labor

Kredit: 4

Tantárgyfelelős: Torkos Kornél egyetemi docens

A tantárgyfelelős tanszéke: Analitikai Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: a vegyész MSc belépési követelményei

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása: elválasztástechnikai módszerfejlesztések alapjai, származékképzési eljárások, kísérlettervezés, mintaelőkészítési módszerek, környezet és élelmiszeranalitikai módszerek, csatolt technikák (GC-MS, HPLC-MS) alkalmazása, vezérlőszoftverek használata, minőségbiztosítási ismeretek.

Kötelező irodalom*:

Kremmer T. Torkos K. Szókán Gy. Az elválasztástechnika elmélete és gyakorlata.

Eötvös Kiadó 2005.

Ajánlott irodalom:

Interneten közreadott gyakorlati előírások

Tantárgy neve:	A levegő és vízkörnyezet minősítése
-----------------------	-------------------------------------

Kredit:	2
Tantárgyfelelős:	Salma Imre
A tantárgyfelelős tanszéke:	Analitikai Kémiai Tsz.
Előtanulmányi feltételek:	környezetkémia előadás

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

A levegő kémiai minősítése:

a levegőszennyező források és anyagok csoportosítása, a levegőszennyezés folyamata, a környezeti levegő tisztasági követelményei, magyar jogszabályok a jogharmonizáció után, határértékek, szmogriadó, nemzetközi összehasonlítások; kémiai vizsgálati és analitikai módszerek szennyező gázok és légköri aeroszol mérésére, az expozíció csökkentésének lehetőségei

A vízkörnyezet kémiai minősítése:

a víz körforgása, víztípusok, vízkészletek, vízfelhasználás; a vízminőség fogalma; a természetes vizek összetétele, a vízszennyezés fogalma, pontszerű és diffúz szennyezés, természetes és antropogén eredetű szennyezés; tipikus szennyező anyagok, ezek határértékei, meghatározásuk elvei; az élővizekbe és a közsatornába való vízbeocsátás szabályai, a természetes vizek öntisztuló képessége; a vizek szennyezésének csökkentésére vonatkozó nemzetközi és hazai előírások; a hazai felszíni és felszín alatti vizek minősítése, vízminőségi térképek; az ivóvíz minősítése, az ivóvíz-előkészítés hazai vonatkozásai; vizsgálati módszerek, mintavétel és mintatartósítás, terepi gyorseszteszt, terepi és laboratóriumi műszeres vizsgálatok, monitoring

Kötelező irodalom*:

Manahan, S.E., Environmental Chemistry, 6th or 7th ed., Lewis, Boca Raton, 1994.

Ajánlott irodalom:

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

Ligetvári Ferenc : Környezetünk és védelme 3. kötet, Vízminősítés, vízkezelés könyvfejezet, 9-128 oldal, Ökológiai Intézet a Fenntartható Felődésért Alapítvány, Miskolc, 2000.

Tantárgy neve: A magkémia alkalmazásai

Kredit: 2

Tantárgyfelelős: Dr. Homonnay Zoltán, egyetemi tanár

A tantárgyfelelős tanszéke: Analitikai Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: A magkémia alapjai (KA2MG1) vagy ezzel analóg tárgy

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

A magkémia alapjainak áttekintése. Nukleáris kémiai analitikai módszerek, mint hagyományos és prompt gamma neutronaktivációs analízis, gamma spektroszkópia, alfa-visszaszórás, béta visszaszórás, XRF, PIXE. Nukleáris szerkezetvizsgáló módszerek: Mössbauer-spektroszkópia, Pozitronannihilációs spektroszkópia. Elektronspektroszkópiák. Sugárkémia. A forráatom-kémia alapjai. Radioizotópok ipari alkalmazása. Stabil izotópok előfordulása a természetben, felhasználásuk, izotópdúsítási módszerek. Atomreaktorok és nukleáris energiatermelés. Biokémiai, biológiai és orvosi alkalmazások, sugárvédelem.

Kötelező irodalom*:

Kiss István, Vértes Attila: Magkémia, *Akadémiai Kiadó*, Budapest, 1979

Ajánlott irodalom:

A. Vértes, S. Nagy, Z. Klencsár: Handbook of Nuclear Chemistry, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht-Boston-London (2003)

Joseph Magill, Jean Galy: Radioactivity, Radionuclides, Radiation, Springer, Berlin, 2005

G. Choppin, J.O.Liljenzin, J.Rydberg, Radiochemistry and Nuclear Chemistry, Butterworth-Heinemann, 2002.

Tantárgy neve: Műszeres analitika labor II.

Kredit: 4

Tantárgyfelelős: Oltiné Varga Margit

A tantárgyfelelős tanszéke: Analitikai Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: műszeres analitikai ismeretek és laboratóriumi gyakorlat (ELTE Kémia BSc. esetén: a Műszeres analitikai labor 1. elvégzése)

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Nyomnyi fenolos típusú vegyületek brómozást követő meghatározása, GC-vel elektronbefogásos detektorral, Duna vízben. Toxikus nehézfémnyomok meghatározása anódos stripping technikával, finomvegyeszerekben, csapvízben. Atomabszorpciós analízis grafitkemencés módszerrel, esővíz, hó mintákban. ICP atomemissziós módszer alkalmazása hidridgenerátorral kapcsolva, talajminták As szennyezésének meghatározása. Neurotranszmitter típusú katekolaminok meghatározása nagynyomású folyadékkromatográfiával UV és elektrokémiai detektorral. Termoanalitikai vizsgálatok nemzetközi szabványok szerint. (Gumi, cement, műanyag minták). Különböző nagyteljesítményű analitikai módszerek interaktív ACOL program segítségével történő tanítása számítógéppel.

Kötelező irodalom:

Sokszorosított gyakorlatleírások és a műszeres analízis vonatkozó tárgyköreiből kiadott sokszorosított előadásvázlatok és műszerleírások

Ajánlott irodalom:

Tantárgy neve: Nukleáris analitika labor

Kredit: 4

Tantárgyfelelős neve: Süvegh Károly egyetemi docens

A tantárgyfelelős tanszéke: Analitikai Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: a vegyész MSc. belépési követelményei, alapvető magkémiai ismeretek (ELTE kémia BSc. elvégzése esetén: A Magkémia alapjai; másoknak: ezzel ekvivalens ismeretek; pótolható: A nukleáris tudományok alapjai MSc. speciális kollégiummal)

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Manipuláció nyílt radioaktív izotópokkal, nyomjelzéstechnika, gamma-spektroszkópia, röntgen-fluoreszcenciás analízis (XRF), Rutherford-visszaszórás, nukleáris szerkezetvizsgáló módszerek, aktivációs analízis, prompt-gamma spektroszkópia

Kötelező irodalom:

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

mérésleírások (a félév elején kiosztásra kerülnek)

a mérésleírások elektronikusan is elérhetők:

www.chem.elte.hu/departments/magkem/hun/oktatas/magkemlab.html

Ajánlott irodalom:

Nagy Sándor: Nukleáris mérések statisztikája (Valószínűség-számítási összefoglaló

alkalmazásokkal). Az elektronikus jegyzet letölthető a

<http://www.chem.elte.hu/Sandor.Nagy/okt/nms/index.html> webhelyről egyéb témába vágó dokumentumokkal együtt.

Szervetlen Kémia

Tantárgy neve: Rendszeres fémorganikus kémia

Kredit: 2 kredit

tantárgyfelelős neve/tanszéke: Szepes László egyetemi tanár

Szervetlen Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: a vegyész MSc belépési követelményei, alapvető fémorganikus kémiai ismeretek (ELTE kémia BSc elvégzése esetén: Fémorganikus kémia (kv1n1en5); másoknak ezzel ekvivalens ismeretek)

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

az alkáli és alkáli földfémek szerves kémiájának jellemző vonásai, szerves Zn-, Cd- és Hg-vegyületek. Szerves B- és Al- származékok, a Ga, In és Tl σ - és π - kötésű vegyületei, a 14. csoport (Si, Ge, Sn, Pb) tetra-, tri- és diszubsztituált szerves származékai, a 15. csoport (P, As, Sb és Bi) penta-, tri-, di- és monoszubsztituált termékei, Se- és Te-organikus vegyületek. Legfontosabb ligandumok és koordinációs vegyületeik az átmenetifémek szerves kémiájában. Fémorganikus reakciók az átmenetifém és a ligandumok környezetében, homogén katalízis. Átmenetifém-átmenetifém kötésű vegyületek és oligonukleáris klaszterek. Spektroszkópiai módszerek a fémorganikus kémiában.

Kötelező irodalom:

Faihl, F., Kollár, L., Kotschy, A., Szepes, L., Szerves Fémvegyületek Kémiája, Nemzeti Tankönyvkiadó, Budapest, 2001.

Ajánlott irodalom:

Elschmbroich, Ch., Salzer, A., Organometallics, VCH, Weinheim, 2nd edition, 1992.

Cotton, F.A., and Wilkinson, G., Advanced Inorganic Chemistry, John Wiley, New York, 5th edition, 1988, vagy újabb kiadások.

Tantárgy neve: Bioszervetlen kémia

KV3EN7

Kredit: 2

tantárgyfelelős neve/tanszéke: Oltiné Varga Margit egyetemi docens

Analitikai Kémia Tanszék

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

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

A létfontosságú és mérgező elemek élő szervezetekben betöltött szerepe, valamint ennek a szerepkörnek a molekuláris szinten történő magyarázata a legújabb kutatási eredmények alapján. A szervetlen-, analitikai-, biokémiai stb. ismeretek integrálása, az alapismeretek kibővítése orvosi, biológiai, élettani ismeretekkel, az élő rendszerekre alkalmazott speciális mérési technikákkal.

Kötelező irodalom*:

Varga Margit Bioszervetlen kémia, *ELTE Eötvös Kiadó*, Budapest, 2006

Ajánlott irodalom:

Kőrös Endre Bioszervetlen kémia, *Gondolat*, Budapest, 1980

Gergely Pál, Erdődi Ferenc, Vereb György, Általános és bioszervetlen kémia, *Semmelweis Kiadó*, 1992

Wagner Ödön, Hencsei Pál Bioszervetlen kémia, *Műegyetemi Kiadó*, 2001

Tantárgy neve: Fémorganikus és katalízis labor

kv1n4en6

Kredit: 5 kredit

tantárgyfelelős neve/tanszéke: Szepes László egyetemi tanár

Szervetlen Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: a vegyész MSc belépési követelményei, alapvető fémorganikus és szerves kémiai gyakorlati ismeretek. (ELTE kémia BSc elvégzése esetén Fémorganikus kémia (kv1n1en5) és Szerves kémia 1 labor (kv1n4es3); másoknak ezzel ekvivalens ismeretek.)

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

A tárgy oktatásának elsődleges célja az, hogy ismereteket adjon és készségeket fejlesszen a korszerű preparatív és manipulációs technikák, valamint modern anyagi rendszerek – mint például fémorganikus reagensek, klaszterek, átmenetifém katalizátorok, felületi keménybevonatok – területén. A kurzus további célja az, hogy irányított és ellenőrzött módon bevezesse a hallgatókat az önálló kutatómunka minden egyes munkafázisába a szemeszter végén elvégzendő egyéni gyakorlat keretében.

Kötelező irodalom:

Csonka István, Kotschy András, Mörtl Mária, Szalay Roland, Szepes László és Vass Gábor: Fémorganikus kémiai és katalízis laboratóriumi gyakorlatok (elektronikus tanszéki oktatási segédanyag)

Faigl Ferenc, Kollár László, Kotschy András, Szepes László: Szerves Fémvegyületek Kémiaja, Nemzeti Tankönyvkiadó, Budapest, 2001., I.-III. fejezet

Tantárgy neve: Fémorganikus kémia

kv1n1en5

Kredit: 2 kredit

tantárgyfelelős neve/tanszéke: Szepes László egyetemi tanár

Szervetlen Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: a vegyész MSc belépési követelményei, alapvető szervetlen és szerves kémiai ismeretek. (ELTE kémia BSc elvégzése esetén Szervetlen kémia 1(kv1n1en1) és 2 (kv1n1en2), Szerves kémia 1(kv1n1es1) és 2(kv1n1es2); másoknak ezzel ekvivalens ismeretek.)

Az elsajátítandó ismeret rövid (néhány soros leírása:

a tárgy oktatásának elsődleges célja az, hogy áttekintő ismereteket adjon a fémorganikus kémiáról, a szerves fémvegyületek legfontosabb csoportjairól, azok fizikai és kémiai sajátosságairól, előállításáról, kémiai reakcióiról, valamint alkalmazásairól.

Kötelező irodalom:

Faigl Ferenc, Kollár László, Kotschy András, Szepes László: Szerves Fémvegyületek Kémiája, Nemzeti Tankönyvkiadó, Budapest, 2001., I.-III. fejezet

Tantárgy neve: Katalízis labor

Kredit: 4

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

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

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

reakciók inert közegben, katalízis alapfogalmak, reakciók analitikai (TLC, GC, HPLC, NMR) követése, heterogén katalízis, homogén katalízis, aszimmetrikus szintézis, keresztkapcsolási reakciók, metatézis, hidrogénezés, katalitikus reakciók kinetikájának vizsgálata

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 szerkezetvizsgáló módszerek

Kredit: 2

tantárgyfelelős neve/tanszéke: Rohonczy János / Szervetlen Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: a vegyész MSc. belépési követelményei

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

A tárgy célja az iparban is legelterjedtebb, modern szerkezetvizsgáló módszerek (infravörös-, Raman-, UV- fotoelektron-, NMR spektroszkópia, tömegspektrometria, Röntgen-diffrakció, valamint - a GC-MS, illetve HPLC-NMR kapcsolt technikák miatt fontos - GC- és HPLC- elválasztási módszerek mérés technikájának és a kapcsolódó elméleti ismereteknek a bemutatása az egyes területeken tevékeny oktatók/kutatók bevonásával. Az egyes berendezések felépítésének, valamint az alkalmazható módszerek főbb metodikai változatainak és azok teljesítő képességének ismertetése. A "problémához keress módszert!" elv bemutatása gyakorlati példákon keresztül.

Kötelező irodalom*:

Ajánlott irodalom:

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

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

Tantárgy neve: Modern szerkezetvizsgáló módszerek laborgyakorlat

Kredit: 4

tantárgyfelelős neve/tanszéke: Rohonczy János / Szervetlen Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: Modern szerkezetvizsgáló módszerek előadás felvétele

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

A tárgy célja a hasonló nevű előadáson megismert modern szerkezetvizsgáló módszerek (infravörös-, Raman-, UV- fotoelektron-, NMR spektroszkópia, tömegspektrometria, Röntgen-diffrakció, valamint a GC- és HPLC-elválasztási módszerek berendezéseinek és mérés technikájának, az adott területeken tevékeny oktatók/kutatók irányításával történő gyakorlati megismerése és használata. Az egyes módszerek főbb metodikai változatainak és azok teljesítő képességének gyakorlati kipróbálása.

Kötelező irodalom*:

Ajánlott irodalom:

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

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

Colin F. Poole and Salwa K. Poole: Chromatography today (Elsevier, 1991)

Tantárgy neve: Szerkezeti kémia

Kredit: 2

Tantárgyfelelős neve/ tanszéke: Csámpai Antal /Szervetlen Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: Sikeres vizsgák: Szervetlen kémia, Szerves kémia, Elméleti kémia.

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

A legfontosab kémiai szerkezet-vizsgálati módszerek elvi alapjainak és gyakorlati alkalmazhatóságuk ismerete egyes vegyületcsoportokra. Egyszerűbb és összetettebb szervetlen vegyületek elektron-és térszerkezete és reaktivitása, előállításuk és a kialakult szerkezet közötti összefüggések felismerése különös tekintettel a poliatomos borán-, karborán-, metallokarborán- és fémklaszterekre. A kémiai kötésre vonatkozó különböző szintű elméletek megfelelő alkalmazása az egyes vegyületcsoportok szerkezetének értelmezésénél.

Kötelező irodalom: N. N. Greenwood, A. Earnshaw: Az elemek kémiája I-III. Nemzeti Tankönyvkiadó RT Budapest 1999.

Ajánlott irodalom:

Purcell-Kotz: Inorganic Chemistry

F. Cotton, G. Wilkinson: Advanced Inorganic Chemistry (John Wiley & Sons, 1992.)

Csákvári Béla és Pongor Gábor, Az átmenetifémek és fémorganikus vegyületek sztereokémiája (A kémia újabb eredményei 1998, Akadémiai Kiadó)

Bodor E., Papp S.: Szervetlen Kémia (Tankönyvkiadó, 1983.)

Szerves Kémia

Tantárgy neve: Biokémia

Kredit: 2

Tantárgyfelelős: Gáspári Zoltán

A tantárgyfelelős tanszéke: Szerves Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: Szerves kémia

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Molecular organization of life. The central dogma. Basics of metabolism and metabolic pathways. Protein structure and function. Basic enzyme kinetics and mechanisms. Regulation of gene expression. Biochemistry of sensory systems. Introduction to basic experimental techniques.

Az élet molekuláris szerveződése. A központi dogma. A metabolizmus és anyagcsereútvonalak alapjai. fehérjeszerkezet és -funkció. Alapvető enzimkinetikai ismeretek és reakciómechanizmusok. Az érzékszervek biokémiája. Alapvető kísérletes technikák.

Kötelező irodalom:

Berg-Tymoczko-Stryer: Biochemistry 5th ed.

Ajánlott irodalom:

Bálint Miklós: Molekuláris biológia I-III.

Tantárgy neve: Biomolekuláris kémia I

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 kémia és biokémia tárgyakból, másoknak: ezzel ekvivalens ismeretek)

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Az élet molekuláris tervrajza. Biokémiai reakciók, kofaktorok és transzport molekulák. Fehérjék, enzimek. Nukleinsavak kémiája, a DNS és RNS építőkövei, valamint szerkezete. A DNS és RNS biológiai szerepe, átírás, fordítás, fehérjék célbajuttatása. Evolúciókutatás, bioinformatika

Kötelező irodalom*:

M. Hollósi., L. Laczkó, B. Asbóth, Biomolekuláris kémia I, Nemzeti Tankönyvkiadó, Budapest, 2005

Ajánlott irodalom:

M. Hollósi., B. Asbóth, Biomolekuláris kémia II, Nemzeti Tankönyvkiadó, Budapest, 2007

Tantárgy neve: Elméleti Szerves Kémia

KV4ES7

Tantárgy heti óraszám: 2

kreditértéke: 2

tantárgyfelelős neve: Perczel András

tanszéke: Szerves Kémiai Tanszék

számonkérés rendje: kollokvium

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

- Elméleti kémiai módszerek és lehetőségek rövid áttekintése: szemi-empirikus, ab initio, post-hartree-fock és dft módszerek elmélete
- Reakciótípusok tárgyalása: elméleti kémiai vizsgálatok és kísérleti eredményekkel való összevetésük
- Típusreakciók: Elektrofil addíció, Nukleofil addíció, Aromás elektrofil szubsztitúció, Nukleofil szubsztitúció, Elektrofil elimináció, Nukleofil elimináció és Diels-Alder addíció
- További érintett fejezetek: Oldószer hatás, Rezgési- és NMR-paraméterek, Proton affinitás és pK érték számíthatósága
- Összetett rendszerek vizsgálata

Kötelező irodalom: az előadás megkezdésére elkészülő új jegyzet

Ajánlott irodalom:

Szerves kémiai ábragyűjtemény és jegyzet (tanszéki szerkesztés),

T. W. Graham Solomons, Craig B. Fryhle: Organic Chemistry (seventh edition) ISBN 0-471-19095-0,

L. G. Wade, Jr.: Organic Chemistry (fourth edition) ISBN 0-13-922741-5

Bruckner Győző: Szerves Kémia I-III.

Tantárgy neve: Polimer kémiai és technológiai laborgyakorlat

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:

Számítógépes irodalmazás, polimer szintézisek és módosítási reakciók, polimerek analízise különféle módszerekkel (FT IR, NMR, DSC), gélpermeációs kromatográfia molekulatömeg-eloszlás meghatározására

Kötelező irodalom:

Kiadott segédanyag.

Ajánlott irodalom:

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 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 spektroszkópai 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 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 Kémiai labor 3

Kredit: 4

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:

Szakirodalom-kutatáson alapuló összetett szerves kémiai szintézisek tervezése és kivitelezése. A kémiai reakciók biztonságos kivitelezése és hatékony termék-elkülönítési módszerek alkalmazása (LC, GC, HPLC, kristályosítás, szublimáció, folyadék-folyadék extrakció, stb.). Az anyagi minőség vizsgálata spektroszkópiai eszközökkel (UV, FTIR, MS, NMR).

Kötelező irodalom*:

(1) Szerves Kémiai Praktikum, Szerk.: Orosz György, Nemzeti Tankönyvkiadó, Budapest, 1998.

Ajánlott irodalom:

(1) Vogel's Textbook of Practical Organic Chemistry; Longman Scientific & Technical, UK and John Wiley & Sons Inc. N.Y. 1989.

(2) Natural Products, Raphael Ikan, Academic Press London and New York, 196 1979.

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(ek)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 népesedésváltozások környezeti-kémiai 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

Fizikai Kémia

Tantárgy neve: Az anyag dielektromos, mágneses és optikai tulajdonságai

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 anyagok elektromos (dielektromos), mágneses és optikai tulajdonságainak konzisztens áttekintése mikroszkopikus és makroszkopikus elvek alapján.

Klasszikus és kvantum elektrodinamika alapjai

Elektromos tulajdonságok: elektromos polarizáció, elektromos dipólusmomentum, polarizálhatóság, relatív permittivitás

Mágneses tulajdonságok: mágneses polarizáció és mágneses szuszceptibilitás, paramágnesesség, mágneses rezonancia paraméterek

Optikai tulajdonságok: polarizáció, interferencia, diffrakció, forgatóképesség, törésmutató
Bevezetés a nem-lineáris optikába

Kötelező irodalom*:

Az előadás jegyzetelt anyaga, kiadható/internetes vázlat

Ajánlott irodalom:

Mai fizika, R.P. Feynman, R.B. Leighton, M. Sands, Műszaki Könyvkiadó, Bp.1970

Budó Ágoston, Kísérleti Fizika I-III, Tankönyvkiadó, 1985

P. W. Atkins: Fizikai Kémia II. Szerkezet, Nemzeti Tankönyvkiadó, 2002

P. W. Atkins, R. S. Friedman: Molecular Quantum Mechanics, Oxford University Press, 1997

Kaposi Olivér szerk.: Bevezetés a fizikai kémiai mérésekbe I-II., Tankönyvkiadó

Tantárgy neve: Elektrokémia

Kredit: 3

Tantárgyfelelős neve/tanszéke: Dr. Inzelt György, Fizikai Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: Kémia BSc törzsanyaga fizikai kémiából

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Az elektrokémiai fogalmak, vizsgálatok és technológiák fejlődése és jelentősége. Homogén és heterogén elektrokémiai rendszerek egyensúlyi termodinamikai leírása. Az elektrokémiai kettős réteg szerkezete. Az elektródfolyamatok kinetikája. Elektrokémiai vizsgálati technikák. Spektroelektrokémia. Felületvizsgáló módszerek. Elektroszorpció. Elektrokatalízis. Szerves vegyületek elektrokémiája. Fotoelektrokémia. Elektrokémiai technológiák. Az elektrokémia a környezetvédelemért. Elektrokémiai érzékelők.

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

Ajánlott irodalom: Kiss L.: Bevezetés az elektrokémiába, Nemzeti Tankönyvkiadó, 1997.
Erdey-Grúz T.: Elektródfolyamatok kinetikája, Tankönyvkiadó, 1969.
A.J. Bard, L.R. Faulkner: Electrochemical Methods, Wiley, 2000.
Electroanalytical Methods (ed. F. Scholz), Springer, 2002.

Tantárgy neve: Fizikai kémia labor (2)**Kredit: 5****Tantárgyfelelős neve/tanszéke:** Láng Győző, Fizikai Kémiai Tanszék**Előtanulmányi feltételek:** BSc törzsanyag ismerete fizikai kémiából**Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:**

A laboratóriumi gyakorlat célja a fontosabb fizikai kémiai mérési módszerek megismerése, és az alapvető szakmai fogások gyakorlása.

Témák: Fizikai kémiai mérések összetett rendszerekben. Kémiai egyensúlyok tanulmányozása különféle módszerekkel (elektromos vezetés, potenciometria, spektrofotometria), egyensúlyi állandók meghatározása. Transzportfolyamatok jellemző paramétereinek meghatározása. A viszkozitás és a felületi feszültség hőmérsékletfüggésének vizsgálata. A gázkromatográfia alapjai. Homogén és heterogén reakciók kinetikájának tanulmányozása különféle fizikai-kémiai paraméterek (összetétel, abszorbancia, elektromos vezetés, tömegváltozás, térfogatváltozás, forgatóképesség, törésmutató stb.) mérésével, sebességi állandók meghatározása. Elektrokémiai mérések: aktivitási tényezők meghatározása, transzportfolyamatok elektrolitoldatokban, elektródfolyamatok kinetikájának tanulmányozása. Elektrokémiai áramforrások jellemző paramétereinek meghatározása.

Kötelező irodalom*: Kaposi Olivér szerk.: Bevezetés a fizikai kémiai mérésekbe I-II., Tankönyvkiadó (1988.); Szalma József, Láng Győző, Péter László: Alapvető fizikai kémiai mérések és a kísérleti adatok feldolgozása, Eötvös Kiadó (2006.); P.W. Atkins: Physical Chemistry, London (1998)

Ajánlott irodalom:

Kiss László: Bevezetés az elektrokémiába, Nemzeti Tankönyvkiadó (1997.); Inzelt György: Az elektrokémia korszerű elmélete és módszerei I-II. Nemzeti Tankönyvkiadó (1999.); A „Fizikai Kémia (1) – (2)” című előadásokhoz előírt irodalom

Tantárgy neve: Fizikai kémiai laboratóriumi gyakorlatok haladóknak

Kredit: 4

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

Előtanulmányi feltételek: Az összesen két féléves „Fizikai kémiai labor (1)” és „Fizikai kémiai labor (2)” sikeres teljesítése

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása: A tárgy egy féléves laboratóriumi gyakorlat vegyész hallgatók részére.

A gyakorlatok célja: Néhány modern fizikai kémiai kísérleti módszer megismerése, a kísérletek megtervezésének és az eredmények feldolgozásának gyakorlása. A gyakorlatok témái: Összetett rendszerek fázisegyensúlyainak vizsgálata. Egyes anyagok dielektromos és mágneses tulajdonságainak vizsgálata. Spektrofotometriás vizsgálatok infravörös, látható és ibolyántúli hullámhossz tartományokban. A törésmutató mérésének módszerei. Polarimetria. Összetett elektrokémiai mérések (bonyolult kinetikájú elektródfolyamatok vizsgálata forgó korongelektród segítségével, impedanciaspektroszkópia). Vizsgálatok pásztázó alagútmikroszkóppal. Zaj analízise.

Kötelező irodalom*: Kaposi Olivér szerk.: Bevezetés a fizikai kémiai mérésekbe I-II., Tankönyvkiadó (1988.); Szalma József, Láng Győző, Péter László: Alapvető fizikai kémiai mérések és a kísérleti adatok feldolgozása, Eötvös Kiadó (2006.); Richard P. Wayne: Chemical Instrumentation, Oxford (1995.)

Ajánlott irodalom:

C. J. F. Böttcher: Theory of Electric Polarization, Amsterdam (1973); A. J. Bard: Instrumental Methods in Electrochemistry, New York (2001.);

Tantárgy neve: Határfelületi kémia**Kredit: 2****Tantárgyfelelős neve/tanszéke:** Kiss Éva, Fizikai Kémiai Tanszék**Előtanulmányi feltételek:** Kolloidkémia, fizikai kémia**Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:**

Természetes és mesterséges felületaktív anyagok és környezeti hatásuk. Felületaktív polimerek. Felületi erő mérési módszerek. Felületmódosítási eljárások. Heterokoaguláció (kölsönhatás különböző anyagi minőségű felületek között). Kolloid elválasztási technikák. Makro- és mikroflotálás (ionflotálás). Nanorétegek szerkezete. Rendezett molekularétegek: SA, Langmuir, LB és LbL filmek. Vékony folyadékfilmek. Habok. Monodiszperz kolloid rendszerek. Emulziók, mikroemulziók. Polimer- és polielektrolit – tenzid komplexek. Mikrogélek. “Intelligens anyagok”. Határfelületi reológia. Nyírási és dilatációs jellemzők.

Kötelező irodalom*:

F. McRitchie: Chemistry at Interfaces, Academic Pr. London, 1990.

K. Tsujii: Surface Activity, principles, phenomena and applications, Academic Pr., San Diego, 1998.

B. Jönsson, B. Lindman, K. Holmberg, B. Kronberg: Surfactants and polymers in aqueous solutions, Wiley, Chichester, 1998.

H. Lyklema: Fundamentals of Interface and Colloid Science, vol III, Academic Pr., San Diego, 2000.

Ajánlott irodalom:

J. Israelachvili: Intermolecular and Surface Forces, Academic Pr., London, 1992.

Tantárgy neve: Kiegészítő fejezetek a fizikai kémiához

Kredit: 2

Tantárgyfelelős neve/tanszéke: Baranyai András, Fizikai Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: Kémiai BSc törzsanyaga fizikai kémiából

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

A BSc fizikai kémia I-II tárgyakra épülő ismeretanyag elsődlegesen az ott nem vagy csak jelzésszerűen érintett részterületek tömör bemutatása. Ide tartozik az axiomatikus termodinamika; nemegyensúlyi termodinamika és transzportfolyamatok; mérnöki termodinamika; elemi hidrodinamika és reológia; bevezetés a szilárdtestfizikába; folyadékkristályok, kvázikristályok, üvegek; bevezetés a kémiai káosz és a fraktálok világába; az információelmélet alapjai.

Kötelező irodalom*:

Ajánlott irodalom:

Callen, Thermodynamics and introduction to thermostatics (J. Wiley, 1985); Smith, Van Ness, Abott, Chemical engineering thermodynamics (McGraw-Hill, 2001); Moore, Physical Chemistry (Longman, 1972); Kittel, Introduction to solid state physics, (J. Wiley, 1971); Hilborn, Chaos and Nonlinear Dynamics (Oxford, 1994); Bird, Armstrong, Hassager, Dynamics of polymeric liquids (J. Wiley, 1987); deGennes, Prost, The physics of liquid crystals (Oxford, 1993)

Tantárgy neve: Kölcsönhatások kolloid- és nanorendszerekben

Kredit: 2

Tantárgyfelelős neve/tanszéke: Gilányi Tibor, Fizikai Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: Kémia BSc törzsanyaga kolloidika és felületkémiából

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Határfelületi többletenergia és következményei.

A határfelületi (Gibbs-féle) termodinamika alapjai.

Adszorpció különböző határfelületeken, adszorpciós izotermák, az adszorpciós réteg állapotegyenlete

A határfelület elektromos szerkezete (Gouy-Chapman modell)

Kölcsönhatások kolloid és nanorendszerekben. Előállítás és stabilitás.

Határfelületek és kolloid rendszerek külső erőterekben.

Kötelező irodalom*:

Az előadás jegyzetelt anyaga, internetes jegyzet.

Ajánlott irodalom:

Wolfram Ervin, Kolloidika, I., II/1, jegyzet, Tankönyvkiadó, Budapest, 1989.

D. J. Shaw: Bevezetés a kolloid- és felületi kémiába. Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1986.

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

Tantárgy neve: Korszerű kolloidkémiai vizsgálati módszerek

Kredit: 0+4

Tantárgyfelelős neve/tanszéke: Gilányi Tibor, Fizikai Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: Kémia BSc törzsanyaga kolloidika és felületkémiából

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Elektrokinetikai potenciál meghatározása lézer-Doppler elektroforézissel.

Dinamikus fényszóródás mérések.

Dinamikus nedvesedés vizsgálata tenziometrikus módszerrel.

Koaguláció-kinetika mérések dead-stop módszerrel.

Langmuir filmek vizsgálata.

Polielektrolit-tenzid komplexek töltésének meghatározása.

Polimer-tenzid oldatok dinamikus felületi feszültségének mérése csepp-profil analízissel.

Határfelületek vizsgálata nem-lineáris optikai módszerrel (SFG).

Határfelületek vizsgálata atomerő mikroszkóppal.

Kötelező irodalom*:

Kiadható/internetes laboratóriumi gyakorlat leírások.

Ajánlott irodalom:

Wolfram Ervin: Kolloidika, Tankönyvkiadó, Budapest

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

Tantárgy neve: **Makromolekulák és biopolimerek önszerveződő rendszerei**

3

Tantárgy kreditértéke: 2 +0

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

előadó: Dr. Nagy Miklós

Előtanulmányi feltételek: Kémia BSc törzsanyaga fizikai kémiából és kolloidikából

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Makromolekulák és polimerek alapvető szerkezeti sajátosságai. A makromolekuláris kémia alapjai. Makromolekulák kémiai és fizikai jellemzése. Egy- és többkomponensű makromolekuláris rendszerek. A konformáció kérdése szintetikus és természetes makromolekulák esetén. Hierarhikus és önszerveződő struktúrák. Rendeződés és szerveződés. A szerkezet és funkció kapcsolata. Vizsgálati módszerek.

Kötelező irodalom:

Wolfram Ervin egyetemi jegyzet I. - III. kötet, kijelölt fejezetek
Rohrsetzer Sándor: Kolloidika, Tankönyvkiadó, kijelölt fejezetek

Ajánlott irodalom:

L. Mandelkern: An Introduction to Macromolecules English Univ. Press, London, Springer-Verlag, Berlin, New York, Heidelberg, 1972
H. Morawetz: Macromolecules in Solution, John Wiley and Sons, New York, London, Sydney, Toronto, 1975
A.G. Walton, J. Blackwell: Biopolymers, Academic Press, New York, London, 1973

Tantárgy neve: Molekulák elektronszerkezete

Kredit: 2

Tantárgyfelelős neve/tanszéke: Szalay Péter, Fizikai Kémia Tsz.

Előtanulmányi feltételek: Kémiai Matematika, Kvantummechanika

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Atomok elektronszerkezete, atompályák fogalma; Atomok spektruma; Kéttomos molekulák elektronszerkezete, molekulapálya fogalma; Molekulapálya elmélet; Hartree-Fock módszerek; Többatomos molekulák elektronszerkezet; VB elmélet; Konjugált molekulák elektronszerkezete, Hückel-elmélet; Átmenetifém-komplexek elektronszerkezete, kristálytérelmélet, ligandumtér-elmélet; Periodikus rendszerek elektronszerkezet, sávméret, Brillouin-zóna, vezetés, félvezetés, szigetelés. Elektronszerkezet számításának módszerei.

Kötelező irodalom*:

Az előadás jegyzetelt anyaga, kiadható/internetes vázlat

Török F. és Pulay Péter: Elméleti Kémia I, Nemzeti Tankönyvkiadó, 1994.

P. W. Atkins: Fizikai Kémia II. Szerkezet, Nemzeti Tankönyvkiadó, 2002

Ajánlott irodalom:

Peter Attkins és Ronald Freidman: Molecular Quantum Mechanics, Oxford University Press, 2005

Tantárgy neve: Reakciókinetika

kredit: 3

tantárgyfelelős neve: Dr. Keszei Ernő

tanszéke: Fizikai Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: kémia BSc törzsanyag fizikai kémiából

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Kémiai reakciók molekuláris értelmezése. Reakció-potenciálfelületek. Az átmeneti komplex elmélet kvázi egyensúlyi és dinamikai leírása. A variációs átmenetikomplex-elmélet. Bonyolult reakciómechanizmusok analitikus és numerikus megoldása. A kvázistacionárius megoldások hibája. Nagyszámú elemi lépést tartalmazó mechanizmusok redukciója. Oldatreakciók leírása. Ionos és poláros átmeneti komplexek viselkedése poláros oldószerben. Kinetikai sóhatás. Diffúziókontrollált reakciók homogén kinetikája. Izotópeffektusok. Lineáris szabadenergia függvények és egyéb félkvantitatív összefüggések. Enzimreakciók kinetikája. Savbázis katalízis általános leírása. Kísérleti módszerek a reakciókinetikában, különös tekintettel a nanoszekundum-femtoszekundum időskálára. Az átmeneti komplex kísérleti megfigyelése. Kinetikai eredmények numerikus kiértékelése. Egzotikus dinamikai rendszerek. Oszcilláló reakciók. Kémiai káosz.

Kötelező irodalom: M.J. Pilling, P.W. Seakins: Reakciókinetika, Budapest, 1997

Ajánlott irodalom: P. W. Atkins: Physical Chemistry, Budapest, 2002

Tantárgy neve: **Statisztikus mechanika**

Kredit: 3+0

Tantárgyfelelős neve: Baranyai András, Fizikai Kémiai Tsz.

Előfeltétel: kémiai BSc törzsanyaga fizikai kémiából

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

A statisztikus mechanika feladata
Molekulák káotikus viselkedésének jellemzése
Konzervatív és disszipatív rendszerek
Az ergodikus hipotézis és a keveredés
Mikrokanonikus sokaság
A II. főtétele értelmezése
A kanonikus sokaság
Termodinamikai potenciálfüggvények és egyéb sokaságok
Az állapotösszeg és a termodinamikai tulajdonságok kapcsolata
Fluktuációk és nemegyensúlyi rendszerek
Transzport együtthatók mikrofizikai elmélete
Összevetés a kvantumstatisztikus mechanikával
Gázok, folyadékok és szilárd testek statisztikus mechanikájának alapjai
Számítógépes szimulációk mint statisztikus mechanikai kísérletek

Kötelező irodalom:

az előadás jegyzetelt anyaga

Ajánlott irodalom:

Baranyai A, Schiller Róbert, Statisztikus mechanika vegyészeknek (Akadémiai kiadó, 2003)

Tantárgy neve: Számítógépes gyakorlatok A

Kredit: 0+4

Tantárgyfelelős neve/tanszéke: Fogarasi Géza, Szervetlen Kémia

Előtanulmányi feltételek: Fizikai kémiai és elméleti kémiai alapismeretek

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Molekulaszerkezetek, reakciómechanizmusok és biológiai érdekes rendszerek molekuláris modellezése témában:

Kereskedelmi számítógép-programok használata a kémiában. Szemiempirikus és *ab initio* kvantumkémiai számítások: molekulapályák, elektronszerkezet; molekulageometriák

optimalizálása, rezgési frekvenciák, infravörös és Raman spektrumok számítása. Elektromos és mágneses tulajdonságok, magmágneses-rezonancia (NMR)-spektroszkópia.

Reakciómechanizmusok tanulmányozása, átmeneti állapotok, relatív energiák. Biomolekulák izomerjei és konformerjei.

Kötelező irodalom :

Frank Jensen: Introduction to Computational Chemistry, John Wiley & Sons, Chichester, New York; 1999. ISBN: 0 471 98425 6.

Ajánlott irodalom:

Christopher J. Cramer: Essentials of Computational Chemistry, John Wiley & Sons, Chichester, 2002. ISBN: 0 471 48552 7.

Errol Lewars: Computational Chemistry, Kluwer Academic, Boston/Dordrecht/London, 2003. ISBN: 1-4020-7285-6.

Tantárgy neve: Számítógépes gyakorlatok B

Kredit: 0+4

Tantárgyfelelős neve/tanszéke: Baranyai András

Előtanulmányi feltételek: Fizikai kémiai és elméleti kémiai alapismeretek

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

B: Statisztikus mechanikán alapuló és reakciókinetikai modellezések:

A klasszikus statisztikus mechanikai alapokon álló számítógépes szimulációs eljárások:

Monte Carlo és molekuláris dinamikai szimulációk. Molekulamechanika. Kevert: klasszikus és kvantum mechanikai szimulációk, reakciódinamikai számolások. Mezoszkopikus szimulációk. Reakciókinetikai számolások.

Kötelező irodalom:

Ajánlott irodalom:

Baranyai A., Schiller R., Statisztikus mechanika vegyészeknek (Akadémiai, 2003)

Christopher J. Frank Jensen: Introduction to Computational Chemistry, John Wiley & Sons, Chichester, New York; 1999. ISBN: 0 471 98425 6.

Cramer: Essentials of Computational Chemistry, John Wiley & Sons, Chichester, 2002. ISBN: 0 471 48552 7.

Errol Lewars: Computational Chemistry, Kluwer Academic, Boston/Dordrecht/London, 2003. ISBN: 1-4020-7285-6.

Tantárgy neve: Számítógépes kémia

Kredit: 2+2

Tantárgyfelelős neve/tanszéke: Tóth Gergely, Fizikai Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: Kémia BSc törzsanyaga fizikai és elméleti kémiából

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Az előadások során a módszerek elméleti háttéréről lesz szó, a gyakorlatokon az adott témákban kész programokkal végeznek számításokat a hallgatók.

Jelfeldolgozás: interpoláció, simítás, deriválás, integrálás, Fourier transzformáció.

Reakciókinetikai számítások

Kondenzált fázisok klasszikus mechanikai szimulációi: Monte Carlo és molekuláris dinamika

Kvantumkémiai számítások

Biomolekulák modellezése

Számítógépes gyógyszertervezés

Kötelező irodalom*:

Az előadás jegyzetelt anyaga, kiadható/internetes vázlat

Ajánlott irodalom:

Baranyai A, Schiller Róbert, Statisztikus mechanika vegyészeknek ,Akadémiai, 2003.

Valkó P. és Vajda S.: Műszaki–tudományos feladatok megoldása személyi számítógéppel, Műszaki, 1987.

Veszprémi Tamás, Fehér Miklós: A kvantumkémia alapjai és alkalmazása, Műszaki, 2002.

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

Kémia újabb eredményei 80. kötet, Akadémiai, 1995.

Tantárgy neve: Szerkezetvizsgáló módszerek 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:**

A tantárgy célja az alapképzésben megismert fizikai kémiai ismeretanyagon túlmenően megismertetni a hallgatókat mind a kvantumkémia eszköztárával, mind a modern elméleti szerkezetkutatás részleteivel. Ennek megfelelően az ismeretanyag: potenciális energia és tulajdonság hiperfelületek; a Coulomb-kölcsönhatást figyelembe vevő illetve azon túlmenő Hamilton operátorok, azok elmélete, valamint alkalmazásai; akár a relativisztikus hatások figyelembe vételére is alkalmas technikák megismerése, különös tekintettel az első- és másodrendű perturbációs számításra; sugárzás és anyag kölcsönhatásának elmélete; időfüggő perturbációs számítás; rezgési energiaszintek számítása variációs és perturbációs módszerekkel; a GF módszer; elektronszínképek elmélete; NMR spektrumok elmélete.

Kötelező irodalom*

- (1) Török Ferenc, Pulay Péter: Elméleti kémia I, Nemzeti Tankönyvkiadó: 1994.
- (2) Török Ferenc (Szerk.): A kémiai szerkezetvizsgáló módszerek elmélete, ELTE TTK jegyzet: 1974.
- (3) Kapuy Ede, Török Ferenc: Az atomok és molekulák kvantumelmélete, Akadémiai Kiadó: Budapest, 1975.
- (4) Császár Attila: Előadási fóliák (fénymásolat, ELTE TTK KTCS könyvtár).

Ajánlott irodalom:

- (1) Császár Attila, Szalay Viktor: Molekularezgések elméleti vizsgálata, Akadémiai Kiadó: 1998.