

## A Debreceni Egyetem Kémiai Tudományok Doktori Iskola képzési programja és kutatási területei

### A Magyar Képesítési Keretrendszer

Az MKK8 szint (Munkahelyi Képességek Követelményszint 8) a Magyar Képesítési Keretrendszer (MKKR) egyik legmagasabb szintje, amely jellemzően a doktori fokozathoz vagy azzal egyenértékű tudományos, illetve művészeti teljesítményhez kapcsolódik. Ez a szint olyan tudást és készségeket ír le, amelyek túlmutatnak a mesterképzésen: az adott szakterület legújabb és legmélyebb ismereteinek elsajátítását, valamint azok önálló és kreatív alkalmazását követeli meg.

Az MKK8 szinthez tartozó kompetenciák közé tartozik az új tudományos eredmények létrehozása, a kutatás módszertani megalapozottsága, a komplex problémamegoldás, valamint az új elméletek és megoldások kidolgozásának képessége. Ezen a szinten a szakember képes önállóan és vezető szerepben hozzájárulni a tudomány, a technológia vagy a művészet fejlődéséhez, emellett nemzetközi szinten is bekapcsolódhat szakmai diskurzusokba.

Röviden: az MKK8 szint az önálló, innovatív, felelősségteljes és nemzetközileg elismert szakmai-kutatói tevékenység szintje.

### Bevezetés

A modern értelemben vett kémiai kutatások kilenc évtizedre tekintenek vissza Debrecenben. A Debreceni Egyetem különböző karain működő kémiai tanszékek és az akadémiai kutatócsoport(ok) a tudományág legaktuálisabb és legizgalmasabb kérdéseit vizsgálják. Nemzetközileg is számontartott eredmények születtek több területen, például a nemlineáris kémiai dinamika, a vizes közegű fémorganikus katalízis, redoxi reakciók kinetikája, az aminosavak és peptidok fémkomplexei, biológiailag aktív és gyógyászatiilag alkalmazható fémkomplexek, a természetes szerves vegyületek (alkaloidok, antibiotikumok, flavonoidok, és szénhidrátok) és szintetikus származékaik, különféle enzimek hatásmechanizmusa, és a kationos polimerizáció kutatásában. Jelentősek a szerkezeti kémia, szerkezeti biológia és a környezeti műszeres analitika módszereinek fejlesztésére irányuló kutatások is.

### A „Kémia” doktori program, 1993-tól 2000-ig

Az 1993-ban történt akkreditációt követően a Kossuth Lajos Tudományegyetem, majd később a Debreceni Egyetem doktori (PhD) címet adományozhatott a kémia tudományából. A „Kémia” doktori program, melynek vezetője 1993-1996 között Dr. Lipták András akadémikus, egyetemi tanár, 1997-től pedig Dr. Joó Ferenc akadémikus, egyetemi tanár volt, a következő alprogramokat foglalta magába:

- K/1 Reakciókinetika és katalízis (Vezető: Dr. Beck Mihály, Dr. Joó Ferenc)
- K/2 Koordinációs kémia (Vezető: Dr. Brücher Ernő)
- K/3 Környezeti és műszeres analitikai kémia (Vezető: Dr. Papp Lajos, Dr. Posta József)
- K/4 Makromolekuláris és felületi kémia (Vezető: Dr. Zsuga Miklós)
- K/5 Szénhidráttartalmú természetes és szintetikus anyagok kémiája, biokémiája és szerkezetvizsgálata (Vezető: Dr. Sztaricskai Ferenc)
- K/6 Természetes eredetű heterociklusok és analógjaik szintézise és szerkezetvizsgálata (Vezető: Dr. Antus Sándor)

### **A Kémiai Tudományok Doktori Iskola, 2000-től 2013-ig**

A Magyar Akkreditációs Bizottság döntésével 2000 őszétől akkreditációt nyert a Debreceni Egyetem Kémia Doktori Iskolája. Az Iskola vezetője 2009-ig Dr. Joó Ferenc akadémikus, egyetemi tanár volt, 2009 szeptemberétől pedig Dr. Gáspár Vilmos egyetemi tanár irányította a Doktori Iskola Tanács munkáját. A Doktori Iskola a korábbi doktori program felépítésének megfelelően, ám megújult személyi bázison kezdte meg működését. Ennek megfelelően 2000-től 2013-ig a Kémiai Tudományok Doktori Iskola hat *Program* együtteseként működött.

- K/1 Reakciókinetika és katalízis (Vezető: Dr. Joó Ferenc)
- K/2 Koordinációs kémia (Vezető: Dr. Sóvágó Imre)
- K/3 Környezeti és műszeres analitikai kémia (Vezető: Dr. Posta József, Dr. Fábíán István)
- K/4 Makromolekuláris és felületi kémia (Vezető: Dr. Zsuga Miklós, Dr. Kéki Sándor)
- K/5 Szénhidrátok kémiája és biokémiája  
(Vezető: Dr. Sztaricskai Ferenc, Dr. Herczeg Pál, Dr. Somsák László)
- K/6 Természetes eredetű heterociklusok és analógjaik szintézise és szerkezetvizsgálata  
(Vezető: Dr. Antus Sándor)

### **A Kémiai Tudományok Doktori Iskola, 2013-től 2024-ig**

A Kémiai Tudományok Doktori Iskola Tanácsa 2013. március 13-i határozatának megfelelően a képzés hatékonyságának növelése érdekében és figyelembe véve a személyi feltételekben időközben bekövetkezett változásokat, a K/2 és K/3, illetve K/5 és K/6 képzési programokat összevonta. Az átalakítás nem érintette a doktori hallgatók státuszát, képzési programját, és változatlan maradt a tantárgyi struktúra ill. annak dokumentációja a Neptunban is. A változtatásokat a 2013/14. tanévben vezettük be. A Doktori Iskola vezetője 2016. júniusától 2023. áprilisáig Dr. Kövér Katalin akadémikus, egyetemi tanár volt. 2023. áprilisától a Doktori Iskola vezetője Dr. Fábíán István egyetemi tanár.

- K/1 Reakciókinetika és katalízis (Vezető: Dr. Joó Ferenc)
- K/2 Koordinációs és analitikai kémia (Vezető: Dr. Fábíán István)
- K/4 Makromolekuláris és felületi kémia (Vezető: Dr. Kéki Sándor)
- K/5 Szénhidrátok és heterociklusok kémiája és kémiai biológiája  
(Vezető: Dr. Somsák László)

### **A Kémiai Tudományok Doktori Iskola, 2024-től napjainkig**

A Kémiai Tudományok Doktori Iskola tanácsának a javaslatára a 2024. január 16-án tartott törzstaggyűlés elfogadta a doktori iskola programjainak új felosztását és az új programvezetőkre tett javaslatát. Az átalakítás nem érintette a doktori hallgatók státuszát, képzési programját, és változatlan maradt a tantárgyi struktúra ill. annak dokumentációja a Neptunban is.

Az új felosztást 2024. február 01-től vezettük be.

A Doktori Iskola vezetője 2025. augusztus 1-től Dr. Kurtán Tibor egyetemi tanár.

- K/1 Reakciómechanizmusok és katalízis (Vezető: Dr. Fábíán István)
- K/2 Koordinációs kémia (Vezető: Dr. Tiricsó Gyula)
- K/3 Analitikai kémia (Vezető: Dr. Gáspár Attila)
- K/4 Makromolekuláris és felületi kémia (Vezető: Dr. Kéki Sándor)
- K/5 Szénhidrátok és heterociklusok kémiája és kémiai biológiája (Vezető: Dr. Kurtán Tibor)

A következőkben a jelenállapotnak megfelelően bemutatjuk az egyes programokat, tevékenységi körüket és kutatási témáikat.

## **K/1 Reakciómechanizmusok és katalízis (Vezető: Dr. Fábíán István)**

### **A programban résztvevő oktatók:**

Bazsa György; Bényei Attila; Czégény Csilla Enikő; Dudás Zoltán; Fábíán István; Forgács Attila; Horváth Henrietta; Hollóczki Oldamur; Joó Ferenc; Kalmár József; Kathó Ágnes; Len Adél; Lihi Norbert; May Nóra; Papp Gábor; Szabó Mária; Tóth Zoltán; Udvardy Antal

### **Kutatási témák**

Fémorganikus katalízis vizes közegben és alkalmazása szerves kémiai szintézisekben. Katalitikus oldatreakciók mechanizmusa. Összetett kinetikájú redoxi reakciók mechanizmusa. Funkcionalizált aerogélek szintézise és jellemzése. Molekuláris katalizátorok heterogenizálása. Szilárd fázisú reakciók. Röntgendiffrakciós szerkezetvizsgálat alkalmazása a szupramolekuláris kémiában. Szerkezet-meghatározás pordiffrakciós adatokból. Gyógyszerhatóanyagok polimorfizmusának vizsgálata. Számítógépes molekulamodellzés.

### **A Doktori Program leírása**

A program a nagy hagyományú reakciókinetikai, valamint anyagtudományi kutatások eredményeire épül.

A homogén katalízis kutatások terén vizsgáljuk a vizes közegű fémorganikus katalízis feltételeit és alkalmazásait (pl. hidrogénezés, deuterálás, redoxizomerizáció, szén-szén keresztkapcsolások), továbbá a szén-dioxid és a nitrogén-oxid homogénkatalitikus átalakításait. Oldható katalizátorként elsősorban tercier foszfin, N-heterociklusos karbén és hidrogénezett szalén (szalán) ligandumokat tartalmazó platinafém-komplexeket alkalmazunk, melyek szintézise és jellemzése alapvető jelentőségű kutatásainkban. Stabilizált fémkolloidokat állítunk elő és tanulmányozzuk azok felhasználását vizes közegben is hatékony hidrogénező katalizátorokként. Mikrofluidikai elven működő hidrogénező reaktor, továbbá a mikrohullámú aktiválás alkalmazásával keressük új típusú szerves szintézisek lehetőségeit. A szilárd fázisú reakciókat elsősorban új ligandumok és katalitikusan aktív fémkomplexek előállítására, valamint ismert katalizátorok egyszerű és gyors előállítási módszereinek kidolgozására alkalmazzuk. Az eredmények alapján új kémiai hidrogéntárolásra alkalmas reakciórendszereket fejlesztünk ki. Bolygóműves- és vibrációs-golyós malmok felhasználásával sztenderdizált őrlési programokat dolgozunk ki mechanokémiai reakciókhoz.

Az összetett kinetikájú redoxireakciók mechanizmuskutatása során a következő témaköröket tanulmányozzuk: a klór, a kén(IV), az oxiklór és peroxo vegyületek, valamint a reaktív oxigén gyökök (ROS) redoxireakciói; szubsztituált 1,10-fenantrolin- N-oxidok szintézise, jellemzése és koordinációs kémiája; az O<sub>2</sub> aktiválása; a ROS-ok koncentrációját szabályozó metalloenzimek modellezése. A kutatások során i) azonosítjuk és jellemezzük a reaktív köztitermékeket; ii) részleteiben feltárjuk a reakciórendszerek kinetikai sajátosságait és meghatározzuk az egyes lépésekre a sebességi egyenletet; iii) azonosítjuk a domináns reakcióutakat; iv) feltárjuk az egymással versengő reakcióutak közötti kinetikai csatolásokat; v) az összes kísérleti adat együttes kiértékelésével részletes modelleket dolgozunk ki a kinetikai és sztöchiometriai sajátosságok értelmezésére. Az eredmények hasznosulhatnak az említett

vegyületek gyakorlati alkalmazásai – környezeti kémia, ivó- és szennyvízkezelés, szürke vizek újrahasznosítása, fertőtlenítés, fehérités, nagy hatékonyságú ipari oxidációs eljárások stb. – során, illetve lehetővé teszik különböző in vivo redoxifolyamatok kémiai hátterének megértését is.

Az aerogélek kutatása során optimalizált módszereket dolgozunk ki olyan nagyporozitású anyagok szintézisére, melyek alkalmasak többek között a következő alkalmazások megvalósítására: toxikus fémionok eltávolítása vízből és levegőből; speciális az űrtechnológiában is alkalmazható hőszigetelő rendszerek létrehozása; nagyhatékonyságú heterogén katalizátor rendszerek kialakítása; mesterséges aktív csontpótlás; új gyógyszerhordozók kifejlesztése, enzimek immobilizálása; fotokatalitikus aerogél hibrid rendszerek előállítása. Részletesen tanulmányozzuk az aerogélek összetétele, szerkezete és különböző fizikai és kémiai sajátságai közötti összefüggéseket. Az eredmények alapján lehetőség nyílik speciális tulajdonságú új funkcionizált anyagok tervezésére és előállítására.

Szorosan csatlakozik az említett kutatási területekhez az előállított új vegyületek, heterogén katalizátorok és aerogélek szerkezetvizsgálata. Ehhez egykristály röntgendiffrakciós szerkezetvizsgálati módszert alkalmazunk. A szilárd halmazállapotú anyagok tanulmányozásának a további területei: szupramolekuláris kémia, szerkezet-meghatározás pordiffrakciós adatokból, és a gyógyszer-hatóanyagok polimorfizmusának vizsgálata.

A programhoz tartozó valamennyi kutatási területen a kísérleti adatok alátámasztására kiterjedten alkalmazzuk a számítási kémia módszereit is. Emellett számítógépes molekulamodellizációs módszerekkel vizsgáljuk a nanoműanyagok környezetre és emberi egészségre gyakorolt hatását. Ezek a kutatások hozzájárulnak annak megértéséhez, hogy a nanoműanyagok milyen kölcsönhatásba lépnek a biomolekulákkal és hogyan változtatják meg a fehérjék másodlagos szerkezetét, illetve a sejtmembránok struktúráját. Az eredményeket felhasználva tisztázni kívánjuk, hogy az említett kölcsönhatások milyen módon járulhatnak hozzá különböző neurodegeneratív betegségek kialakulásához.

A Kémiai Tudományok Doktori Iskola Tanácsának döntése értelmében ezen a programon belül folynak a kémia alap-, közép- és felsőfokú oktatásának didaktikai kérdéseivel foglalkozó kutatások. Kiterjedt elemzésekkel vizsgáljuk az oktatás szerepét az ifjúság, illetve a felnőtt lakosság kémiai ismereteinek, szemléletmódjának kialakításában, a szakember-utánpótlás biztosításában. Általános és középiskolás tanulók körében rendszeres felméréseket végzünk a fogalmi fejlődést meghatározó tényezők (tankönyv, tanítási módszer, hétköznapi tapasztalatok stb.) hatásának és szerepének megismerésére. Célunk a tanulókat leginkább jellemző tudásszerkezet feltárása a tudástérelmélet és a szóasszociációs módszerek felhasználásával.

#### **Doktori kurzusok:**

Bényei Attila: Röntgendiffrakciós szerkezetvizsgálat  
Czégény Csilla Enikő: A homogén fémorganikus katalízis alkalmazása  
Fábián István, Szabó Mária: Gyorsreakciók kinetikája  
Hollóczki Oldamur: Válogatott fejezetek az elméleti kémiából  
Papp Gábor: Komplexkatalizált szerves szintézisek  
Kalmár József: Haladó kemometria  
Nagy Péter: Redox kémia biológiai rendszerekben  
Udvardy Antal: Mechanokémiai szintézisek

**K/2 Koordinációs kémia (Vezető: Dr. Tircsó Gyula)****A programban résztvevő oktatók:**

Baranyai Zsolt; Brücher Ernő; Buglyó Péter; Dóka Éva; Farkas Etelka; Garda Zoltán; Mason Nigel John; Kállay Csilla; Kálmán Ferenc Krisztián; Nagy Péter; Sóvágó Imre; Szikra Dezső; Tircsó Gyula; Tóth Imre; Várnagy Katalin

**Kutatási témák**

Koordinációs kémiai kutatások bioszervetlen kémiai témakörökben. Orvosdiagnosztikai vizsgálatokban fontos lantanoidák komplexei oxigén- és nitrogéndonor polifunkciósligandumokkal. Elemorganikus kémia. Összetett kinetikájú redoxi reakciók mechanizmusa. Funkcionalizált aerogélek. Szűrkevizek újrahasznosítása. Környezetanalitika új kapcsolt technikás műszeres módszerekkel. A mikrofluidika analitikai kémiai alkalmazásai. Környezetszennyezők meghatározása (humán)biológiai és környezeti mintákban. Nagyhatékonyságú mintabeviteli módszerek az atomspektroszkópiában. Elemspeciációs módszerek.

**A Doktori Program leírása**

A program két korábbi doktori program (koordinációs kémia, valamint környezeti és műszeres analitikai kémia) összevonásával jött létre. Az egyes kutatási területek több szálon kapcsolódnak egymáshoz, az egyes kutatócsoportok által üzemeltetett laboratóriumok egymást kiegészítve és erősítve összetett tudományos programok megvalósítását teszik lehetővé.

A program keretében folyó koordinációs kémiai kutatások legnagyobb területét a bioszervetlen kémiai indíttatású témakörök alkotják. Ezen belül az egyik legkiterjedtebb kutatási terület a létfontosságú nyomelemek (Fe, Cu, Zn, Ni, Co, Mn, Mo) aminosavakkal, peptidokkal és származékaikkal alkotott komplexeinek egyensúlyi és szerkezeti (UV-Vis, CD, ESR, NMR, MS) vizsgálata, amelyek elsődleges célja a fémionok és a neurodegeneratív elváltozások közötti lehetséges összefüggések feltárása. A vizsgált ligandumok egy másik fontos csoportját a hidroxámsavak és származékaik képviselik és az elért eredmények mind a metalloenzimek modellezését, mind az enzimreakciók gátlásának megértését elősegíthetik. Az enzimek szerkezeti és funkcionális modelljeinek kialakításához a ligandumok és komplexek elektrokémiai sajátságainak részletes tanulmányozására is sor kerül. A bioaktív, félszendvics Ru-hidroxamátkomplexek előállítása és szerkezeti jellemzése komoly perspektívákat nyit új humán-gyógyászati alkalmazások kidolgozásában.

A bioszervetlen kémiai kutatások másik nagy területe egyes toxikus elemek (pl. Pb, Pd, Ce, Al, Ga, Tl stb.) és az orvosdiagnosztikai vizsgálatokban fontos fémek (pl. Gd, Tm, Yb, Mn stb.) oxigén- és nitrogéndonor polifunkcionális ligandumokkal alkotott komplexeinek termodinamikai, kinetikai és szerkezeti jellemzése. A lehetséges ligandumok köre magába foglalja az aminosavakat és foszfinátokat, valamint a különböző funkcionálizált makrociklusos poliaza-polikarboxilátokat. A program része új komplexképzők szintézise, kiválasztott képviselőik kovalens kötással aerogél hordozóhoz rögzítése, új aerogél kompozitok előállítása, és a kapott új anyagok koordinációs kémiai, analitikai, kromatográfias és orvosi biológiai tulajdonságainak, felhasználási lehetőségeinek vizsgálata.

A program részét képezi a fém-fém kötést (Pt-Tl, Pd-Tl, Pt-Sn) tartalmazó komplexek és Mo(VI)-peroxo vegyületek előállítás, szerkezetük és képződési kinetikájuk meghatározása, illetve az új anyagok optikai, elektromos vezetési és mágneses tulajdonságainak jellemzése. Ezen témakörhöz kapcsolódva a multinukleáris 1D és 2D NMR technika alkalmazása jó lehetőséget teremt a fémkomplexek intermolekuláris ligandumcsere és intra-molekuláris izomerizációs folyamatainak vizsgálatára.

Az elemorganikus kémia területén olyan szelektív fémorganikus szintézismódszerek kifejlesztése a cél, amelyek semleges vizes közegben is működőképesek. A fémionok és a ligandumok megfelelő választásával funkciós csoportok szelektív redukcióját, szén-szén kötés kialakítását, valamint természetes eredetű, biológiailag aktív molekulák átalakítását lehet megvalósítani.

A program keretébe tartozik a környezeti kémiai szempontból fontos összetett kinetikájú redoxi reakciók (klór-oxidok, ózon, kén(IV) stb.) részletes mechanizmusának feltárása is. Ezen belül alapvető cél a reakciók főbb törvényszerűségeinek és sztöchiometriájának megismerése, a képződő közttermékek gyorskinetikai módszerekkel történő azonosítása, jellemzése és a helyes kinetikai modellek megalkotása. Végző soron olyan kinetikai modellek kidolgozására kerül sor, amelyek jól hasznosíthatók az említett vegyületek gyakorlati alkalmazásai – vízkezelés, szürke vizek újrahasznosítása, fertőtlenítés, fehérítés, nagy hatékonyságú oxidációs eljárások stb. – során. Az eredmények lehetővé teszik különböző in vivo redoxifolyamatok kémiai hátterének megértését is.

Az aerogélek funkcionálásának célja olyan nagyporozitású rendszerek létrehozása, melyek alkalmasak többek között a következők speciális alkalmazásai megvalósítására: toxikus fémionok eltávolítása vízből és levegőből; nagyhatékonyságú heterogén katalizátor rendszerek kialakítása; mesterséges aktív csontpótlás; új gyógyszerhordozók kifejlesztése, enzimek immobilizálása; fotokatalitikus aerogél hibrid rendszerek előállítása.

A környezetanalitika témakörében gáz, folyadék és szilárd alkotók összetételének és kölcsönhatásainak vizsgálata új nyomelemanalitikai, elválasztástechnikai és kapcsolt technikás műszeres analitikai módszerekkel. E vizsgálatok természetes és antropogén eredetű környezetszennyezők, valamint gyógyszerhatóanyagok és metabolitjaik meghatározását célozzák biológiai, humánbiológiai és környezeti mintákban. A kutatások során a minták esszenciális, illetve toxikus nyomelemtartalmának, valamint kis koncentrációkban is potenciálisan biológiai hatású szerves komponenseinek analízisére kerül sor. A vizsgálatok kiterjednek ivóvíz, felszíni és tengervíz, levegőben levő szállóporok és gázalkotók, talajextraktumok, folyami, tavi és lápi üledékek, vészérum, vér, vizelet, testszövetek, haj, madártoll, élelmiszerek, dohány, dohányhamu, gyógyszerek, gyógyhatású készítmények stb. elemzésére. Példaként említhető a szelén, mint stressz, ill. infarktus kivédő species(-ek) kutatása, az ismeretlen szívhalálok és a nyomelemháztartás közötti kapcsolat vizsgálata. Humánbiológiai szempontból jelentőséggel bír a hormonháztartást megváltoztató komponensek, az úgynevezett EDC anyagok (endocrine disrupting chemicals) meghatározására alkalmas analitikai módszerek fejlesztése. A környezetanalitika külön területének tekinthető a folyami lápi és tavi üledékek széleskörű rétegvizsgálata, mely adatok segítségével történetileg rekonstruálni lehet a terület környezeti állapotának múltbeli változásait.

A kutatások körébe tartozik nagyhatékonyságú mintabeviteli módszerek kidolgozása és optimalizálása az analitikai atomspektroszkópiában. E témakörben az impulzus, a flow injection (FIA) mintabevitel, a hidraulikus nagynyomású porlasztás (HHPN), az elektrotermikus elpárologtatás (ETV), a hideggőz (CV) és hidridtechnikás (HG) mintabeviteli módszerek tanulmányozása és alkalmazása szerepel. A módszerfejlesztések egy másik területe az összetett mátrixokban nyomnyi mennyiségben jelenlévő szerves komponensek analíziséhez szükséges mintaelőkészítési eljárások (szeparálás, dúsítás), illetve kapcsolt technikákkal (GC/MS, LC/MS) történő meghatározási módszerek kidolgozása.

Új analitikai területnek számít a környezet- és nyomelemanalitikában az elemspeciációs módszerek bevezetése. Az esszenciális és toxikus nyomelemek összes koncentrációjának meghatározása mellett környezeti és biológiai minták esetén megfelelő módszerek kidolgozására kerül sor az adott nyomelem eltérő vegyértékű és kötésállapotú formáinak elválasztására és az egyes formák nagyérzékenységű on-line vagy off-line detektálására. GC, HPLC és kapilláris elektroforézis (CE), valamint elektrotermikus elpárologtatás (ETV) elválasztó módszerek nagy érzékenységű elemszelektív detektorokkal: FAAS, GFAAS ICP/AES és ICP/MS módszerekkel kombinálva higany, ólom, arzén, króm stb. speciációs analízisét teszik lehetővé különböző eredetű mintákban.

Intenzív kutatások folynak a kapilláris elektroforézis általános és bioanalitikai alkalmazásaival kapcsolatban is. E munka célja a mintabeviteli módszerek tökéletesítése, az elválasztási módszerek hatékonyságának növelése és a fehérjék emésztése során kapott minták analízisével kapcsolatos kérdések tisztázása. Nagy érzékenységű módszerek kidolgozására kerül sor a kapcsolt CE/MS módszer segítségével.

A mikrofluidikai kutatások elsődleges célja olyan analitikai rendszerek kialakítása, melyek a lab-on-a-chip koncepció mentén alkalmasak komplex analitikai kémiai módszerek környezeti, biológiai mintákban gyors és megbízható analízisére.

### **Doktori kurzusok**

Buglyó Péter: Elem- és fémorganikus kémia

Kálmán Ferenc Krisztián, Lihi Norbert: Koordinációs kémia

Tircsó Gyula: Makrociklusos komplexek kémiája

Várnagy Katalin: Bioszervetlen kémia

### **K/3 Analitikai kémia (Vezető: Dr. Gáspár Attila)**

#### **A programban résztvevő oktatók:**

Baranyai Edina; Bodnár Ildikó; Braun Mihály; Gáspár Attila; Huszánk Róbert; Juhász Zoltán; Kertész Zsófia; Posta József; Pokoraczkine Andrási Melinda

#### **Kutatási témák**

Analitikai és környezetanalitika módszerek kifejlesztése és alkalmazása elsősorban gyógyszerészeti, klinikai, orvosdiagnosztikai, proteomikai, élelmiszeripari és környezetvizsgálati területeken. Különböző spektrometriás (elsősorban tömeg-, atom és röntgenspektrometriás) és elválasztástechnikai (kromatográfia, elektroforézis) módszerek kifejlesztése, kapcsolása és alkalmazása. Ionnyaláb-analitika. Környezetszennyezők meghatározása (humán)biológiai és környezeti mintákban. Légköri aeroszolok vizsgálata.

Elem-speciációs módszerek. A mikrofluidika analitikai kémiai alkalmazásai, lab-on-a-chip rendszerek kidolgozása és alkalmazása. Szerkezetvizsgálati módszerek kifejlesztése.

### A Doktori Program leírása

Intenzív kutatások folynak a kapilláris elektroforézis általános, bioanalitikai és proteomikai alkalmazásai területén. Ezeknél a vizsgálatoknál a komponensek nagyhatékonyságú elválasztását követően azok érzékeny detektálására, illetve a komponensek (főleg gyógyszervegyületek, fehérjék, monoklonális antitestek) szerkezetének felderítésére tandem tömegspektrometriát alkalmaznak. A vizsgálatoknál külön hangsúlyt kapnak a fehérjék poszttranszlációs módosulatainak meghatározásai. A biológikumok (biotechnológiai úton előállított, makromolekulákat hatóanyagként tartalmazó gyógyszerek) nagy hatékonyságú, kevesebb mellékhatásokkal bíró korszerű gyógyszeres terápiát nyújtanak. A gyógyszerkutatás minden egyes fázisát analitikai vizsgálatok kísérik végig.

A környezetanalitika témakörében gáz, folyadék és szilárd alkotók összetételének és kölcsönhatásainak vizsgálata új nyomelemanalitikai, elválasztástechnikai és kapcsolt technikus műszeres analitikai módszerekkel. E vizsgálatok természetes és antropogén eredetű környezetszennyezők, valamint gyógyszerhatóanyagok és metabolitjaik meghatározását célozzák biológiai, humánbiológiai és környezeti mintákban. A kutatások során a minták esszenciális, illetve toxikus nyomelemtartalmának, valamint kis koncentrációkban is potenciálisan biológiai hatású szerves komponenseinek analízisére kerül sor. A vizsgálatok kiterjednek ivóvíz, felszíni és tengervíz, szürkevíz, levegőben levő aeroszolok, szállóporok és gázalkotók, talajextraktumok, folyami, tavi és lápi üledékek, vérérum, vér, vizelet, testszövetek, haj, madártoll, élelmiszerek, dohány, dohányhamu, gyógyszerek, gyógyhatású készítmények stb. elemzésére. Példaként említhető a szelén, mint stressz, ill. infarktus kivédő species(-ek) kutatása, az ismeretlen szívhalálokok és a nyomelemlétezés közötti kapcsolat vizsgálata. Humánbiológiai szempontból jelentőséggel bír a hormonlétezés megváltoztató komponensek, az úgynevezett EDC anyagok (endocrine disrupting chemicals) meghatározására alkalmas analitikai módszerek fejlesztése. A környezetanalitika külön területének tekinthető a folyami lápi és tavi üledékek széleskörű rétegvizsgálata, mely adatok segítségével történetileg rekonstruálni lehet a terület környezeti állapotának múltbeli változásait. Az utóbbi időkben régiókban történő nagyarányú iparosítás (pl. akkumulátor-, gépjárműgyártás, gyógyszeripar) különösen fontossá vált a környezeti monitorozásra alkalmas bioindikátorok (pl. mézek, üledékek, növények) bevezetése és alkalmazása.

A kutatások körébe tartozik nagyhatékonyságú mintabeviteli módszerek kidolgozása és optimalizálása az atom- és tömegspektroszkópiában. E témakörben az impulzus, a flow injection (FIA) mintabevitel, a hideggőz, hidridtechnikás és lézerablációs mintabeviteli módszerek tanulmányozása és alkalmazása szerepel. A módszerfejlesztések egy másik területe az összetett mátrixokban nyomnyi mennyiségben jelenlévő szerves komponensek analíziséhez szükséges mintaelőkészítési eljárások (szeparálás, dúsítás), illetve kapcsolt technikákkal (GC/MS, LC/MS, CE/MS) történő meghatározási módszerek kidolgozása.

Fontos analitikai területnek számít a környezet- és nyomelemanalitikában az elem-speciációs módszerek bevezetése. Az esszenciális és toxikus nyomelemek összes koncentrációjának meghatározása mellett környezeti és biológiai minták esetén megfelelő módszerek kidolgozására kerül sor az adott nyomelem eltérő vegyértékű és kötésállapotú formáinak elválasztására és az egyes formák nagyérzékenységű on-line vagy off-line detektálására. GC, HPLC és kapilláris elektroforézis (CE), valamint elektrotermikus elpárologtatás (ETV)



elválasztó módszerek nagy érzékenységű elemszelektív detektorokkal: FAAS, GFAAS ICP/AES és ICP/MS módszerekkel kombinálva higany, ólom, arzén, króm stb. speciációs analízisét teszik lehetővé különböző eredetű mintákban.

A mikrofluidikai kutatások elsődleges célja olyan analitikai rendszerek kialakítása, melyek a lab-on-a-chip koncepció mentén alkalmasak komplex analitikai kémiai módszerek környezeti, biológiai mintákban gyors és megbízható analízisére.

### **Doktori kurzusok**

Braun Mihály: ICP MS

Gáspár Attila: Kapilláris zónaelektroforézis

Gáspár Attila: Mikrofluidika, lab-on-a-chip

Gyémánt Gyöngyi: Korszerű kromatográfiás eljárások

Gyémánt Gyöngyi, Batta Gyula: Szénhidrátok analitikája és szerkezetvizsgálata

Kéki Sándor: Modern tömegspektrometriás módszerek

May Nóra: Paramágneses fémkomplexek szerkezetvizsgálata elektronspin rezonancia spektroszkópia segítségével

Nagy Lajos: Modern folyadékkromatográfiás eljárások

Nagy Noémi: Radioanalitika és alkalmazása

Pokoraczkiné András Melinda: Gélelektroforézis

Posta József: Atomabszorpciós spektrometria

### **K/4 Makromolekuláris és felületi kémia (Vezető: Dr. Kéki Sándor)**

#### **A programban résztvevő oktatók:**

Bányai István; Czifrák Katalin; Kéki Sándor; Kéri Mónika; Kuki Ákos; Lázár István; M. Nagy Noémi; Nagy Lajos; Nagy Tibor; Novák Levente; Szűcs Zoltán; Vajda Nóra; Zsuga Miklós

#### **Kutatási témák:**

Tervezett tulajdonságú polimerek és kopolimerek szintézise. Fényemittáló és alakemlékező polimerek előállítása. Természetes és szintetikus polimerek jellemzése lágyionizációs tömegspektrometriával. Határfelületi reakciók vizsgálata agyagásványokon radioindikációval. Makromolekulás kolloidok és fém-komplexeik. Aerogélek és aerogél-nanokompozitok szintézise és vizsgálata. Nagy- és kifelbontású NMR alkalmazása porózus anyagok és gélek és szolok vizsgálatára.

#### **A Doktori Program leírása**

Kutatási témáink magukba foglalják új funkcionális-, homo- és kopolimerek előállítását és polimeranalóg reakciókkal történő átalakítását, továbbá tervezett szegmenshosszú, lineáris és csillag-alakú amfifilikuskopolimerek és polimer-hálózatok előállítását, a fázisszeperáció transzmissziós elektron mikroszkópos, különböző oldószerekben pedig fényszórás-fotometriával való vizsgálatát. A program során a hallgatók az élő kationos polimerizáció tanulmányozásakor elsajátíthatják a dry-box technika alapjait. A zöld kémiát szem előtt tartva foglalkozunk: biológiailag részben lebontható, új termoplasztikus anyagok szintézisével; reciklált poliuretánok felhasználásával, kenőolaj és kenőolajadalék tulajdonságú szintetikus makromolekuláris szénhidrogének előállításával és vizsgálatával; biopolimerek szintézisével.

A gyógyászathoz kapcsolódó témáink: nyújtott hatású és irányított hatóanyagleadású gyógyszerformák kialakítása és a kioldódás vizsgálata; az így kialakított gyógyszerformák mikro- és makroszerkezetének, a membránok viselkedésének, a diffúziós és ozmotikus viszonyok tanulmányozása; PAMAM dendrimerek oldatbeli szerkezetének és dinamikájának vizsgálata irányított és késleltetett hatóanyag-leadás szempontjából; rosszul oldódó hatóanyagok biohasznosíthatóságának növelése; az eddig ismert módszerek mellett az oldékonyosság javításának új lehetősége polimerek és hatóanyagok extrudálásával; a keletkező „szilárd oldatokban” a dermedés után kialakuló molekuláris diszperz rendszerek vizsgálata. További kutatási területeink: Aerogélek és aerogél-nanokompozitok szintézise és vizsgálata, különös tekintettel a kémiai, műszaki, optikai és orvosbiológia felhasználásokra. Új makrociklusos komplexképzők szintézise és vizsgálata.

Kiterjedt kutatásokat folytatunk továbbá az intelligens polimer alapú rendszerek, úgymint fényemittáló és alakemlékező tulajdonságú vegyületek, polimerek, illetve kompozitok előállítása és karakterizálása területén. Célunk olyan anyagok előállítása, melyek különböző polaritású oldószerekben különböző hullámhosszúságú fényt emittálnak, azaz szolvatokróm hatással rendelkeznek. Ezt a tulajdonságot használhatjuk a mikrokörnyezet (pl. biológiai), polaritásának meghatározására, illetve alkalmazhatóságuk kibővíthetők a molekuláris detektálás területére is. Az alakemlékező polimerek területén témáink: poliuretán alapú kémiaiag térhálósított alakmemória di és triblokk-kopolimerek előállítása. Rugalmas blokkként, jól definiált, élő polimerizációval előállított funkcionális poliizobutilén és/vagy polietilén oxidot építünk be. A térhálós rendszerek mechanikai vizsgálata. Lehetőségek keresése biológiai felhasználásra és kompozitképzésre. Egymásba hatoló egyik fázisában térhálós (semi-IPN) rendszerek alakemlékező képességének vizsgálata, pl. poliuretán/epoxi (PU/EP) alapúak; erősítőanyagok bevétele a visszaalakulás során fellepő erő növelése érdekében.

Analitikai jellegű kutatásaink természetes és szintetikus polimerek modern lágyionizációs tömegspektrometriás módszerekkel történő karakterizálására irányulnak. Polimerek/kopolimerek tulajdonságai és szerkezete közötti összefüggések feltárása mesterséges intelligencia alkalmazásával.

A makromolekulás kolloidokkal kapcsolatos kutatások főbb célkitűzései a következők: poliaminosav típusú polimerek előállítása és funkcionálizálása részleges hidrofobizálása a harmadlagos struktúra módosítása céljából; a keletkezett ligandumok jellemzése és oldatbeli szerkezetének vizsgálata multinukleáris és multidimenziós NMR spektroszkópia segítségével; a makromolekulás ligandumok fémkomplexeinek oldatbeli egyensúlyai, szerkezete és dinamikája; a fémkomplexe alkalmazási lehetőségei környezetvédelmi, katalitikus és gyógyászati szempontból.

A határfelületi reakciók témakörben elsősorban radioindikációs módszerrel vizsgáljuk a növények számára fontos mikroelemek, környezetszennyező kationok, illetve radioaktív szennyező ionok megkötődését agyagásványok felületén. Tanulmányozzuk az agyagásványok felületén lejátszódó katalitikus reakciók mechanizmusát.

Az oldatfázisú NMR spektroszkópia három ága alkalmas szilárd anyagok gélek és szolok vizsgálatára. NMR krioporozimetria segítségével mind lágy mind kemény porózus anyagok pórusmérete meghatározható, ha az 100 nm-nél kisebb. Doktori hallgatóink makromolekulás kolloidok duzzadását, szén nanorészecskék és szénalapú gélek pórusméretét tanulmányozhatják ezzel a technikával. Az NMR diffúziometria nagyobb pórusméretek és pórusszerkezetek

vizsgálatának egyik fontos eszköze. Hallgatóink megismerhetik ezen keresztül a szilárd anyagok és gélek szerkezetének és adszorpciós viselkedésének egy-egy aspektusát. A kis- és nagyfelbontású NMR relaxometria alkalmas kolloidok méretének és dinamikájának vizsgálatára. A jelentkező doktori hallgatók szén nanorészecskéket, és polimerek híg oldatait jellemezhetik ezzel a módszerrel. Itt új távlatokat jelent a kvadrupólus NMR magok ( $^{23}\text{Na}$ ,  $^{17}\text{O}$ ) bevonása.

A doktori iskolában lehetőség nyílik a jövőben szilárdfázisú NMR tanulására is. A szükséges hardver kiépítése megtörtént. Megkezdődnek a kísérletek a módszer bevonására is a program kínálatába.

### **Doktori kurzusok**

Bányai István: Relaxációs módszerek a kémiában

Czifrák Katalin: Műanyagok

Kéki Sándor: Makromolekuláris kémia

Kéki Sándor: Intelligens műanyagok

Kuki Ákos: Vegyipari folyamatok szimulációja

Kuki Ákos: Dimenzióanalízis és hasonlóságelmélet

Nagy Lajos: Modern folyadékkromatográfiai eljárások

Nagy Tibor: Modern tömegspektrometriás módszerek

Novák Levente: Biokolloid rendszerek

**K/5 Szénhidrátok és heterociklusok kémiája és kémiai biológiája (Vezető: Dr. Kurtán Tibor)**

### **A programban résztvevő oktatók:**

Bakai-Bereczki Ilona; Barna Teréz; Batta Gyula; Bokor Éva; Borbás Anikó; Csávás Magdolna; Fekete Anikó; Fekete Erzsébet; Gyémánt Gyöngyi; Herczeg Mihály; Herczegh Pál; Juhász László; Juhászné Tóth Éva; Karaffa Levente; Kerékgyártó János; Kiss Attila; Kónya Krisztina; Kurtán Tibor; Mándi Attila; Somsák László; Szilágyi László; Timári István; Vágvölgyiné Tóth Marietta

### **Kutatási témák:**

Természetes szénhidráttartalmú vegyületek és lényegi alkotóelemeik szintézise. Glikomimetikumok és enziminhibitorok tervezése és szintézise. Glikoenzimek működési mechanizmusainak tanulmányozása. Szénhidrát fehérje kölcsönhatások vizsgálata modern műszeres módszerekkel. Potenciálisan farmakológiailag aktív, kondenzált, királis *O*- és *O,N*-heterociklusok szintézise, szelektív átalakításaik és szerkezetvizsgálatuk. Domino gyűrűzárási reakciók alkalmazása új alapvázú, kondenzált és spirociklusos bioaktív heterociklusok előállítására, melyek kondenzált benzol és/vagy heteroaromás alegységet tartalmaznak. Centrális és axiális kiralitáselemeket tartalmazó, benzol-kondenzált homo- és heterodimer heterociklusok sztereoszelektív szintézise és farmakológiai vizsgálata. Kiroptikai és *in silico* módszerek alkalmazása természetes és szintetikus vegyületek abszolút konfigurációjának és konformációjának vizsgálatára.

### **A Doktori Program leírása**

Az ismert szerves vegyületek több mint fele tekinthető heterociklusnak, túlnyomó többségükben a heteroatom nitrogén, kén és oxigén. A heterociklusos vegyületek számos

farmakológiailag jelentős, természetes eredetű vegyületcsalád – pl. flavonoidok, alkaloidok, antibiotikumok – alapvázát adják, és alapvető szerepük van az élő szervezetekben lejátszódó biokémiai folyamatokban is. A természetes eredetű és szintetikus gyógyszerhatóanyagok és agrokemikáliák nagy része tartalmaz legalább egy heterociklust, melyek hatékony és sztereoszelektív kialakítása a szerves szintetikus kémia komoly kihívása. A Földön a legnagyobb tömegben és legelterjedtebben előforduló szénhidrátok igen gyakran szintén heterociklusokként jelennek meg. A szénhidrátok tanulmányozása a funkciós csoportok és a sztereogén centrumok nagy száma, illetve biológiai sajátosságai okán a szerves- és biokémia többé-kevésbé elkülönült területe, azonban az egyéb tudományterületekkel (pl. analitika, orvosbiológia, anyagtudományok) való kölcsönös egymásra hatás miatt ma már önálló szénhidráttudományról is beszélhetünk.

A szénhidrátok biológiai szerepével, bioszintézisével és átalakulásaival foglalkozó tudományterület, a glikobiológia számos alapvető, elsősorban felismerési folyamatban mutatta ki a cukorszármazékok és konjugátumaik, pl. glikoproteinek és a glikolipidek kulcsszerepét. E tudományterület, illetve a szélesebb értelemben vett szénhidráttudomány rohamos fejlődése napjainkban is tart, és szinergikusan halad az elválasztástechnikai és szerkezetvizsgálati módszerek tökéletesedésével. Hasonlóan más „omika” (pl. genomika, proteomika) területekhez, ma már egy sejt vagy szervezet teljes szénhidrát (glikán) állományának (a glikomnak) szisztematikus tanulmányozása a glikomika tárgyköre.

A heterociklusok és a szénhidrát származékok biológiai szerepei makromolekulákkal, leggyakrabban a (kis)molekulákat felismerő, átalakító, illetve immunválaszt kiváltó fehérjékkel (receptorok/lektinek, (gliko)enzimek, antitestek) való kölcsönhatásaik során valósulnak meg. E kölcsönhatások tanulmányozása kémiai biológiai módszerekkel is lehetséges. Ennek során kis molekulákkal „zavarják meg” biológiai rendszerek működését *in vitro* vagy *in vivo*, és e perturbációkra adott válaszból következtetnek a rendszer lényeges sajátosságaira. Ezek az információk egyebek között a gyógyszertervezésben is felhasználhatók.

A fentiekből mind a szintetikus szénhidrátkémia, mind a heterociklusos kémia számára fontos kutatási területek adódnak: a természetes vegyülettípusok (pl. oligoszacharidok, glikoproteinek, glikolipidek, alkaloidok, antibiotikumok), és/vagy lényegi alkotóelemeik (pl. *N*- és *O*-glikozilezett aminosavak, -peptidek, heterociklusos alapvázak) előállítása; mimetikumok (a természetben található anyagokkal szerkezetükben és/vagy hatásukban analóg vegyületek: pl. C-glikozil származékok, neoglikokonjugátumok, glikodendrimerek, vakcinák, bioizosztér vegyületek) előállítása; inhibitorok tervezése és szintézise, melyek a természetes folyamatokba való beavatkozás lehetőségét adhatják.

### **Doktori programunk ezeken a területeken kínál képzést és kutatási lehetőségeket:**

Szénhidrátok védőcsoportjainak kidolgozása, alkalmazásuk biológiailag aktív oligoszacharidok szintézisére; ciklodextrinek felhasználása lineáris glikozid származékok előállítására; *N*-glikánok és *N*-glikopeptidek szintézise; szénhidrátok anomer centrumának átalakításai gyökös, anionos, karbénos reakciókkal; glikomimetikumok (pl. szénhidrát szulfonsavak, nem klasszikus glikozidkötést tartalmazó származékok, C-glikozil vegyületek, neoglikoproteinek, szénhidrát-aminosav hibridek) glikoenzim (pl. glikozidhidroláz, neuraminidáz, glikoziltranszferáz, glikogén foszforiláz) inhibitorok tervezése és előállítása; SGLT inhibitorok tervezése és előállítása; telítetlen szénhidrátszármazékok átalakítási lehetőségeinek vizsgálata; szénhidrát egységet tartalmazó platinafémkomplexek előállítása; glikoenzimek kötőhely térképezése, aktív helyük és működési mechanizmusuk

tanulmányozása; enzimkatalizált szintézisek; szénhidrát-fehérje kölcsönhatások vizsgálata tömegspektrometriás, ITC és NMR módszerekkel.

Benzollal vagy heteroaromás egységgel kondenzált, királis heterociklusok sztereoselektív szintézise domino gyűrűzárási reakciókkal és további átalakításaik; a királis célvegyületek sztereokémiájának, illetve a reakciók sztereoselektivitásának felderítése kombinált szerkezetvizsgálati (kiroptikai spektroszkópia, röntgendiffrakció, 2D NMR) és *in silico* (DFT mechanizmus számítások, OR, ECD, VCD számítások) módszerekkel; többgyűrűs, kondenzált vagy áthidalt szerkezetű heterociklusok hatékony előállításának vizsgálata domino reakciókkal; speciális gyűrűzárási reakciók (pl. oxa-Pictet-Spengler, intramolekuláris oxa-Michael, hetero Diels-Alder) alkalmazása heterociklusos rendszerek kialakítására. Centrális és axiális kiralitáselemeket tartalmazó, biaril típusú homo- és heterodimer heterociklusok sztereoselektív előállítása farmakológiai és sztereokémiai vizsgálatokra. Sejtostódásgátló, idegsejtvédő és antimikrobiális aktivitás vizsgálata a királis heterociklusos célvegyületeken.

Természetes és szintetikus heterociklusok OR, ECD (HPLC-ECD) és VCD karakterizálása és a kiroptikai adatok DFT számítása. NMR kémiai eltolódás értékek és csatolási állandók DFT számítása relatív konfiguráció meghatározására. Gyűrűzárási reakciók mechanizmusának DFT számítása és aktiválási paraméterek meghatározása.

Fémmentes és fémkatalizált keresztkapcsolási reakciók (C-C és C-N kötések kialakítása) tanulmányozása, szelektivitási viszonyaik tisztázása (pl. Suzuki-Miyaura-, Heck-Mizoroki, Sonogashira-, Buchwald-Hartwig- és Ullman-kapcsolások); *O*-heterociklusos vegyületek C-H aktiváláson alapuló keresztkapcsolási reakcióinak vizsgálata; biológiai aktivitással rendelkező heterociklusos vegyületek szintézise. A fentiekhez szorosan kapcsolódik a szükséges analitikai háttér (GC, HPLC, SCF-LC, GC-MS, HPLC-MS) biztosítása és fejlesztése.

A konkrét kutatási témák évente változó területeket jelöl(het)nek meg, általában jellemző rájuk, hogy a vizsgált területek kémiai, biokémiai, szerkezetvizsgálati és kémiai biológiai aspektusai egyaránt megjelennek bennük.

### Doktori kurzusok

Bakai-Bereczki Ilona: Kábítószer kémia és gyógyászati felhasználása

Batta Gyula: Modern NMR módszerek elmélete

Batta Gyula: NMR operátorképzés I.

Bokor Éva: C-Glikozil vegyületek

Borbás Anikó – Herczeg Mihály: Védőcsoport-manipulációk a szénhidrátkémiában

Borbás Anikó, Herczegh Pál: A kémiai biológia alapjai

Gyémánt Gyöngyi, Barna Teréz: Glikoenzimek

Gyémánt Gyöngyi, Batta Gyula: Szénhidrátok analitikája és szerkezetvizsgálata

Juhász László: Nagyhatékonyságú szintézismódszerek és szénhidrátkémiai alkalmazásuk

Juhászné Tóth Éva: A gyógyszerszintézisekben alkalmazott reakciók mechanizmusa

Kerékgyártó János: Glikozilezési módszerek, oligoszacharidok szintézise

Kónya Krisztina: Fémkatalizált keresztkapcsolási reakciók

Kurtán Tibor: Haladó kiroptikai spektroszkópia

Somsák László: Bevezetés a szénhidrátkémiába

Somsák László: Reaktív indermedierek szénhidrátok anomer centrumán

Timári István: NMR operátorképzés II.

Timári István: NMR több dimenzióban

Vágvölgyiné Tóth Marietta: Glikomimetikumok

## A Debreceni Egyetem (DE) Kémiai Tudományok Doktori Iskola (KTDI) Komplex vizsga tárgyainak listája

### Fő tárgyak:

1. Reakciókinetika
2. Katalízis
3. Kémiai oktatás kutatása
4. Átmenetifémek koordinációs kémiája
5. Főcsoportbeli elemek koordinációs kémiája
6. Műszeres analitika
7. A makromolekuláris kémia
8. Kolloid- és felületi kémia
9. Radiokémia
10. Modern NMR-módszerek
11. Gyógyszerkémia
12. Szénhidrátok kémiája és biokémiája
13. Heterociklusos vegyületek kémiája
14. Antibiotikumkémia
15. Nemfém elemek kémiája
16. Molekulamodellés

### Melléktárgyak:

1. Nemlineáris kémiai dinamika
2. Kismolekulák aktiválása
3. Katalízis a környezetbarát kémiában
4. Relaxációs kinetikai módszerek
5. Átmenetifém-komplex katalízis
6. Kémia tanítása
7. Bioszervetlen kémia
8. A környezetvédelem analitikája
9. Komplexek reakcióinak kinetikája és mechanizmusa
10. Makrociklusos ligandumok és komplexeik
11. Komplex egyensúlyok kémiája
12. Elemorganikus kémia
13. Nemfém elemek koordinációs kémiája
14. Atom- és molekulaspektroszkópia
15. Elektrokémiai analitikai módszerek
16. Elektroforetikus módszerek
17. Kromatográfiai analitikai módszerek
18. Felületi analitikai kémiai módszerek
19. Radioanalitikai módszerek
20. Makromolekulák szintézise és szerkezete
21. Műanyagok
22. Makromolekulák kolloidkémiaja
23. Határfelületi kémia
24. Spektroszkópiai módszerek a kémiai szerkezetfelfedezésben

25. Szén - szén kötés kialakításának szintetikus módszerei
26. Peptidek és fehérjék szerkezetvizsgálata
27. Glikoenzimek
28. Szerves reakciók mechanizmusai
29. Szintonok, retroszintézis
30. Szénhidrátok analitikája
31. Enantio- és diasztereosztereoselektív reakciók kémiája
32. Kémiai anyagtudomány
33. Elméleti kémiai módszerek alkalmazása reakciók mechanizmusának felderítésében és szerkezetvizsgálatban

## A képzési program más lényeges elemei

### A doktori képzés személyi és infrastrukturális feltételei

A „Kémia” doktori programban és a belőle kialakult Kémia Doktori Iskolában nemzetközileg elismert, kiválóan felkészült és nagy tapasztalattal bíró oktatók és kutatók dolgoztak ill. dolgoznak, ami mindenkor garanciát nyújt(ott) arra, hogy a doktori hallgatók korszerű, magas színvonalú képzésben részesüljenek.

A doktori képzés infrastrukturális feltételei, a kutatások technikai, műszeres háttere (az ismert nehézségek ellenére) nemzetközi szinten is megfelelőek, hazai összehasonlításban pedig kiemelkedően jók. A Kémiai Intézet és a KTDI összehangolt fejlesztési programja eredményeként korszerű műszeres laboratóriumokat sikerült kialakítani. Az intézeti központi műszerpark legjelentősebb készülékei: Avance II 400 és Avance II 500 MHz és Avance Neo 700 NMR-spektrométerek, Bruker Nonius MACH3 egykristály röntgen diffraktométer, Bruker MALDI-TOF, ESI-QTOF és QTOF-MS-CE, ill. Pfeiffer kvadрупól tömegspektrométerek, MicroCal ITC200 titrációs kaloriméter, AR550 advanced reométer, Beckman J2-21M ultracentrifuga, Paragon 1000 és Spectrum One FT-IR spektrométer, J-810 Jasco CD spektropolarimeter és csatolt királis HPLC rendszer, J-715 Jasco CD spektropolarimeter, Chiral-IR2X VCD spektrométer, Perkin Elmer Polarimeter 341, Elementar Vario Microcube elemanalizátor, folyamatos áramlásos reaktorok (H-cube, Phoenix reaktor, ASIA flochem reaktorrendszer), és Liberty 1 peptidszintetizátor. A folytonosan bővülő eszközállomány megteremtette és biztosítja annak a lehetőségét, hogy egy-egy tématerületet a legmagasabb tudományos szinten és a közvetlen bemutatás, valamint a realizálás esélyével tudjunk oktatni.

### A Doktori Iskola nemzetközi kapcsolatai

A KTDI kiterjedt nemzetközi kapcsolatokkal bír. Ezek elsősorban az Iskola tanárainak munkássága révén alakultak ki, de léteznek az Iskola egészére vagy a résztvevő oktatási és kutatási egységekre érvényes, szerződéses keretben fenntartott nemzetközi kapcsolatok is. Kihasználjuk az Erasmus program és a Marie Curie ösztöndíjak adta lehetőségeket is, és volt példa a francia-magyar közös PhD képzésre is. A felsoroltakon túlmenően a nemzetközi kapcsolattartás szinte valamennyi formája előfordul(t) (TÉT együttműködések, COST programok, MTA-NSF, MTA-DAAD, MTA-CNRS és más nemzetközi kapcsolatok és ösztöndíjak (pl. Stipendium)). Arra törekszünk, hogy a doktori képzés négy éve alatt lehetőleg valamennyi PhD hallgató részt vegyen külföldi tanulmányúton, mert ezt a képzés fontos elemének tekintjük.

### A doktori képzés célja

A doktori programunkba elsősorban vegyész, kémia tanár és gyógyszerész végzettségű hallgatók jelentkeztek, de felvettünk biomérnök és biotechnológus végzettségű hallgatókat is, mind Magyarországról, mind a határokon túlról. Az elméleti és gyakorlati képzés során a doktori hallgatók megismerkednek a kémia valamely részterületének fontos kérdéseivel. Kísérleti és elméleti kutatásokat végeznek a témakörök ismert problémáinak feltárására és új kutatási célok elérésére. Ezen keresztül elsajátítják a tudományos kutatás legfontosabb módszertani ismereteit.

### Képzési kompetenciák

A doktori hallgató a fokozat megszerzésével képes lesz önálló kutatások végzésére, a szakirodalom alapján kutatásai megtervezésére és végrehajtására. Ismerni fogja és alkalmazni tudja a modern vizsgálati módszereket, s a mérések eredményeit megalapozottan tudja



értelmezni. Kutatása eredményeit nemzetközi szakfolyóiratokban teszi közzé. Tudását a környezet megóvása mellett az alap- és alkalmazott kutatás terén hasznosítja.

### **A doktori képzés formái és követelményei**

A doktori képzés a felsőoktatási törvénynek megfelelően négy év. Ezalatt az idő alatt a doktori hallgatónak 241 kreditpontot kell megszereznie, melyből a nappali tagozatos hallgatóknak 196 kutatási, 13 pedig tanulmányi, illetve 32 oktatási kredit. A levelező tagozatos hallgatók esetében 228 kutatási, 13 tanulmányi kredit megszerzése kötelező.

Egy heti 2 órás, egy szemeszter időtartamú doktori előadás (és vizsga) általában 2 kredit értékű. A Kémia Doktori Iskolában a „A tudományos kutatás etikája” kurzus kivételével nincsenek kötelezően teljesítendő kurzusok. A doktori hallgatók – a témavezető javaslatát is figyelembe véve – szabadon választhatnak a meghirdetett kurzusok közül. A választást elősegítendő a felvehető doktori kurzusok listája elérhető a Kémiai Tudományok Doktori Iskola honlapján összeállított adatbázisban: <https://chemistryphd.unideb.hu/valaszthato-tantargyak-kemiai-tudomanyok-doktori-iskolaban>

Az évenként megújuló *kutatási témakiírások* az Országos Doktori Tanács honlapján található meg: <https://doktori.hu/doktori-kepzes/temakiirasok/>. (A DE Kémiai Tudományok Doktori Iskola azonosítója: 59). Több, mint két évtizedes tapasztalatunk az, hogy az érdeklődők, felvételizők közül sokan találnak szakmai céljaiknak megfelelő, izgalmas kutatási lehetőségeket a Kémiai Tudományok Doktori Iskola által kínált témák között.

A doktori hallgatók nyolc szemeszter alatt végzik el az értekezésük alapjául szolgáló kísérleti, illetve elméleti munkát. A Kémiai Tudományok Doktori Iskola elvárása, hogy a doktori értekezés témakörében legalább két, referált, és impact faktorral rendelkező folyóiratban megjelent (DOI számmal rendelkező, vagy kefélynyomatban elérhető, vagy a folyóirat szerkesztője által igazoltan közlésre elfogadott) közlemény szülessen. Alapkövetelmény, hogy ezek közül legalább egy a jelölt meghatározó hozzájárulásával készüljön.

Egy-egy szemeszterben jellemzően közel harminc, államilag finanszírozott, nappali ösztöndíjas képzésben és néhány önköltséges levelező, illetve egyéni képzésben résztvevő doktori (PhD) hallgató tanul és kutat az Iskola keretében. Utóbbiak tandíjait sokszor a munkahelyük (jellemzően gyógyszergyár vagy akadémiai intézet) fizeti. Az Egyetem és a Richter Gedeon Nyrt. közötti szerződés keretében az elmúlt 10 évben a nappali képzésben részesülő hallgatóink közül évenként egynek a doktori ösztöndíját (kutatási támogatással kiegészítve) a gyógyszergyár fizette.

## Záró gondolatok

Ebben a dokumentumban átfogó képet kívántunk adni a Kémiai Tudományok Doktori Iskola létrejöttéről, felépítéséről, annak változásairól, és a kiemelt kutatási területekről. Ez egyben *képzési programunk* is. Legfontosabb általános jellemzőként kiemeljük, hogy a szervezett doktori (PhD) képzés megindulásától napjainkig eltelt több, mint 25 év alatt 285 doktori fokozatot érdemeltek ki a Kémia Doktori Program, majd később a Kémiai Tudományok Doktori Iskola keretében tanulmányaikat végző vagy oktatóink segítségével egyénileg felkészülő doktori hallgatóink.

A Kémiai Tudományok Doktori Iskola honlapja a <https://chemistryphd.unideb.hu/> címen érhető el.

Debrecen, 2025. szeptember 12.

Dr. Kurtán Tibor  
egyetemi tanár  
a DE Kémiai Tudományok Doktori Iskola vezetője