

Vegyész MSc záróvizsga tételsor 2014

A: törzsanyag, amely az MSc tantervben szereplő törzsanyagba tartozó tárgyak tematikájára épül

- témakörönként 3-4 tételt tartalmaz, ami összesen 28 tételt jelent
- a szakirányosok ebből a tételsorból *egy* tételt, a nem szakirányosok *két* tételt húznak.

A szakirányos tételsorok 15-15 tételből állnak:

B: szakirányú analitikai kémiai ismeretek (analitikus szakirányon levő hallgatók egy tételt húznak)

C: szakirányú szintetikus kémiai ismeretek (szintetikus szakirányon levő hallgatók egy tételt húznak)

D: szakirányú radiokémiai ismeretek (radiokémikus szakirányon levő hallgatók egy tételt húznak)

- a szakirányosok a második tételt a szakirányuknak megfelelő tételsorból húzzák,
- ha párhuzamosan két szakirányt vett fel a hallgató, akkor a törzsanyag mellett mindkét szakirányos tételsorból egy-egy tételt húz.

A- tantárgycsoport
(szervetlen, analitikai, fizikai, kolloid és radiokémia, szerves, bio- és műszaki kémia,
valamint szerkezetvizsgáló módszerek törzsanyag)

1. Az elemorganikus vegyületek definíciója, csoportosítási lehetőségei. A főcsoportbeli elemorganikusok főbb típusai, kötésviszonyaik, előállítási lehetőségeik. Magnézium- és lítiumorganikus reagensek gyakorlati alkalmazási lehetőségei. Izoprényártás Al-organikus katalízissel. Szilikonpolimerek.
2. Az átmenetifém-organikus vegyületek általános jellemzése. Az átmenetifém-alkil-, -karbonil-, -alkén-, valamint a η^4 - η^8 kötémódú komplexek legfontosabb képviselői. Ipari folyamatok fémorganikus katalízissel: (kereszt)kapcsolási reakciók Pd-alkilokkal; a Monsanto-eljárás; alkének hidroformilezése; oxovegyületek szintézise Pd-alkénnel (Wacker-eljárás); homogén fázisú hidrogénezés.
3. A biológiai rendszerek elemi összetétele és az elemek csoportosítása élettani hatásuk szerint. A létfontosságú elemek biológiai szerepe. A biológiailag fontos ligandumok (aminosavak, peptidok, fehérjék, nukleinsavak, porfirinvas vegyületek) komplexképző sajátosságai, metalloproteinek és metalloenzimek tulajdonságai. Az alkálifémek és alkáliföldfémek szerepe biológiai rendszerekben. Kationmegoszlás, transzportfolyamatok.
4. Az oxigénmolekula tárolása, szállítása és aktiválása. A vas és a réz biológiai szerepének csoportosítása, részvételük a biológiai oxidációs folyamatokban. A cink biológiai szerepe, fontosabb cinktartalmú enzimek. Az egyéb nyomelemek (molibdén, mangán, kobalt, vanádium, szilícium, króm, szelén, stb.) biológiai szerepe. A bioszervetlen kémiai ismeretek gyógyászati és környezetvédelmi alkalmazásai.
5. Az izotópia speciális területei, az izotópeffektusok termodinamikája, magreakciók, a nukleáris energiatermelés és környezetvédelmi kérdései.
6. A határfelület fogalma. Adszorpció oldatokból, a töltött felület kialakulása és szerkezete, elektromos kettősréteg. Az elektródfolyamatok kinetikája, a csereáramsűrűség fogalma, a Butler–Volmer-egyenlet és gyakorlati alkalmazása. Elektrokémiai áramforrások: primer és szekunder elemek, tüzelőanyag elemek.
7. A fluid határfelületek. Laplace-nyomás, kapilláris jelenségek. Biológiai és biokompatibilis határfelületek. Biológiai folyamatok fizikai kémia leírása és értelmezése, az élő szervezet termodinamikája és szabályozási jelenségeinek vizsgálata. Enzimkinetika.
8. Kémiai dinamikai jelenségek és termodinamikai hátterük: multistabilitás, oszcilláció, káosz; nyílt rendszerek, a minimális entrópiatermelés elve és az általános evolúciós kritérium.
9. Funkciós csoportok hatékony kialakításának módszerei, funkciós csoportok interkonverziója, oxidatív és redukzív átalakítások. Szintionok fogalma, típusaik. Retroszintézis elve, szerves molekulák retroszintetikus analízise. A legfontosabb diszkonnekciók bemutatása (példákkal).

10. Védőcsoportok, védőcsoport osztályok bemutatása. Alkohokok, fenolok és diolok védésére alkalmas védőcsoportok, alapvető védési és hasítási technikái. Amino, karbonil és karboxil csoport védésére alkalmas védőcsoportok, alapvető védési és hasítási technikák.

11. C–C kötés (egyszeres és többszörös) kialakítása: Sav és bázis katalizált reakciók. Enolátok és rokon vegyületek szintetikus alkalmazása. Fémorganikus reagensek és átmenetifém-katalizált kapcsolási reakciók alkalmazása.

12. Heterociklusos vegyületek csoportosítása és nevezéktanuk. Három- és négytagú, egy heteroatomot tartalmazó heterociklusok előállításuk és reakcióik. π -elektronfeleslegű és elektronhiányos aromás heterociklusok jellemzése. Öttagú több heteroatomot tartalmazó vegyületek. Hattagú, több heteroatomot tartalmazó vegyületek. Héttagú heterociklusos vegyületek.

13. Az atomspektroszkópiai módszerek: atomemissziós módszerek (ICP-AES), atomabszorpciós módszerek (grafitkemencés AAS), ICP-MS. Elvi alapok és gyakorlati alkalmazások. Lehetséges zavaróhatások. Háttérkorrekciós technikák.

14. Elektrokémiai módszerek az analitikai kémiában, a módszerek elve, megvalósítása és alkalmazási lehetőségei. Elektrogravimetria, coulometria. A polarográfia alapjai, eszközei. Polarográfiai módszerek. Inverz voltammetria. Ciklikus voltammetria. Bipotenciometria. Karl Fisher titrálás bipotenciometriás meghatározással.

15. A kromatográfiai módszerek elvi alapja és összehasonlító jellemzésük. A kromatográfiai módszerek megvalósítása és alkalmazási lehetőségei. Ioncserés kromatográfia. Ionkromatográfia. Szuperkritikus fluid kromatográfia. Szuperkritikus fluid extrakció.

16. Az elektroforetikus módszerek elvi alapja és összehasonlító jellemzésük. Az elektroforetikus módszerek megvalósítása és alkalmazási lehetőségei. Gélelektroforézis és alkalmazási területei. Detektálás gélen. Kapilláris elektroforézis és módszerei. Elektroozmózis.

17. A tömegspektrometria elvi alapjai és alkalmazásai. A különböző kísérleti technikák összehasonlítása a teljesítőképesség és alkalmazhatóság szempontjából. Szervetlen kémiai alkalmazásokhoz használható ionforrások és analizátorok. Fragmentációs folyamatok és szabályszerűségeik.

18. Az NMR spektroszkópia elvi alapjai és alkalmazási területei. Rezonanciafeltétel, kémiai eltolódás, magspin-magspin csatolás, elsőrendű spektrumanalízis (gyenge csatolási szabályok). Spektrális paraméterek (^1H és ^{13}C eltolódások, magspin-magspin csatolások) molekulaszervezeti alkalmazásai.

19. A kvantumkémiai számítások elméleti alapjai, a különböző közelítő módszerek jellemzői és korlátai, az egyes módszerekkel nyerhető információk. A számításokhoz használható szoftverek, molekulaszervezet, reakciómechanizmus és termodinamikai számítások példákkal bemutatva.

20. A felületek modern vizsgálati módszerei, nanotechnológiai alapok, a kolloidika biológiai alkalmazásai.

21. Mérlegegyenletek. Áramok. Differenciális mérleg. A transzportelmélet, az általános transzportegyenlet – a műszaki folyamatok rendszerezésének alapja.

22. Hővezetés és diffúzió. Hőcsere áramló folyadékban. Egyensúlyi összefüggések, fázisegyensúly, egyensúlyi görbe, munkavonal.

23. A kémiai reaktorok csoportosítása, működésüket befolyásoló főbb tényezők, matematikai leírásuk. Gyakorlatban használt reaktorok és kiválasztásuk szempontjai.

24. A kőolaj és földgáz összetétele. A kőolaj és földgáz előkészítése. A kőolaj-finomítás két fontos lépése: az atmoszférikus és vákuumdesztilláció, és ezek termékei. A motorhajtó anyagok (motorbenzin, kerozin, Diesel-gázolaj) és a velük szemben támasztott követelmények.

25. A kőolaj-feldolgozás petrokémiai eljárásai: termikus krakkolás (és változatai a késleltetett koksizálás és viszkozitástörés); katalitikus krakkolás, hidrokrakkolás, katalitikus benzinreformálás.

26. Műanyagok. A legnagyobb mennyiségben felhasznált műanyagok: polietilén, polipropilén, poli(vinil-klorid), polisztirol, polietilén-tereftalát, poliuretán. Tulajdonságaik (mechanikai tulajdonságok, hőállóság, vegyszerállóság) és alkalmazásaik.

27. Bioreguláció molekuláris szinten. Fehérje konformáció és szabályzás összefüggése az oxigént tároló és szállító molekulák példáján keresztül. Szabályozás az enzimek szintjén. Az enzimaktivitás szabályozás lehetséges formáinak (allostéria, kovalens módosítás, limitált proteolitikus hasítás, kompartmentalizáció-izoenzimek, szabályozó fehérjék) enzim példákon keresztül történő bemutatása.

28. Idegrendszeri szabályozás: hormonok és receptorok. G-fehérjékkal kapcsolt receptorok szignál útvonala. Foszfatidil inozitol jelátviteli kaszkád és az inzulin aktiválta jelpálya. Génexpresszió szabályozása a transzkripció szintjén a prokariótákban (a lac operon kettős szabályozása) és az eukariótákban (transzkripciós faktorok és hisztonok szerepe).

**B- tantárgycsoport:
(szakirányú analitikai kémiai ismeretek)**

- 1.** A kémiai analízis lépései. A mintavétel fontossága a kémiai analízisban. Mintavételi eljárások megtervezése, statisztikai szempontok. Gázok, folyadékok, szilárd anyagok mintavételi eljárásai. A minta tárolása, tartósítása.
- 2.** Szerves és szervesen minták előkészítése kvantitatív és kvalitatív analitikai kémiai vizsgálatokra: Szervesen és szerves anyagok mintaelőkészítési eljárásai. Atmoszférikus és nagy nyomású roncsolás. Feltárások módszerei. Kjeldahl-roncsolás. Soxhlet-extraktor. SPE, SPME, elődúsítás, automatizált mintakezelés.
- 3.** Kémiai szenzorok jellemzése, csoportosítása: elektrokémiai és félvezető szenzorok, bioszenzorok, optódák. Csillapított teljes reflexió spektrometria (ATR). Felületi plazmon rezonancia spektrometria (SPR). Jelöléses analitikai módszerek főbb típusai: komponensek jelölésének típusai (ELISA).
- 4.** Folyamatos analízis, kinetikai analitikai kémiai módszerek. Buborékszegmentált folyamatos analizátor, FIA, áramlási profilok és értelmezésük, eszközök, on-line mintaelőkészítés, automatikus analízis.
- 5.** Modern folyadékkromatográfiás módszerek. Ioncserés kromatográfia, ionkromatográfia, szuperkritikus fluid kromatográfia, szuperkritikus fluid extrakció.
- 6.** Az elektroforetikus módszerek és legfontosabb alkalmazásai. Gélelektroforézis és alkalmazási területei. Detektálás gélen. Kapilláris elektroforézis. Az elektroforetikus módszerek csoportosítási lehetőségei. Elektrooszmózis. Lab-on-a-chip.
- 7.** Optikai forgatóképesség és cirkuláris dikroizmus. Gyakorlati alkalmazásuk. Elektromágneses sugárzás és anyag kölcsönhatása. Polarizált fény, cirkuláris kettőtörés és cirkuláris dikroizmus jelensége, optikai aktivitás, ORD és CD spektrumok, CD spektroszkópia alkalmazási lehetőségei abszolút konfiguráció meghatározására.
- 8.** Atomspektroszkópiás módszerek. Az atomabszorpció és -emisszió elvi alapjai, eszközei és gyakorlati alkalmazásai. Atomemissziós módszerek. ICP-AES. Lézerablációs mintabevitel. ICP-MS. Atomabszorpció módszerek. Grafitkemencés AAS. Háttérkorrekciós technikák. Lehetséges zavaróhatások.
- 9.** A tömegspektrometria elvi alapjai és alkalmazásai. Fontosabb ionizációs módszerek, analizátorok. A különböző kísérleti technikák összehasonlítása a teljesítőképesség és alkalmazhatóság szempontjából. Kapcsolt technikák: GC-MS, LC-MS, ICP-MS, CE-MS, tandem MS módszerek.
- 10.** Mágneses magrezonancia (NMR) spektroszkópia: alapjelenségek és molekulaszervezeti alkalmazások. Rezonanciafeltétel, kémiai eltolódás, magspin-magspin csatolás, elsőrendű spektrumanalízis (gyenge csatolási szabályok). Spektrális paraméterek (^1H és ^{13}C eltolódások, magspin-magspin csatolások) molekulaszervezeti alkalmazásai. T₁, T₂ relaxáció, Bloch-egyenlet, a dinamikus NMR alapjai.

11. Elektrokémiai módszerek I.: Eszközök és az egyes módszerek főbb alkalmazási területei. Elektrogravimetria. Coulometria. Bipotenciometria. Karl Fisher titrálás bipotenciometriás meghatározással.

12. Elektrokémiai módszerek II.: polarográfiás és egyéb voltammetriás módszerek. Eszközök és az egyes módszerek főbb alkalmazási területei. A polarográfia alapjai, eszközei. Polarográfiás módszerek. Tast-polarográfia. Inverz voltammetria. Ciklikus voltammetria.

13. Termikus analízis. Eszközök, módszerek és fontosabb alkalmazási területeik. TG, DTG, DTA, DSC. A derivatográf. Termometriás titrálások.

14. Az analitikai kémiai mérési eredmények kiértékelése, statisztikai elemzése. A kemometria analitikai kémiai alkalmazásai. Standard addíció módszere, belső standard módszer. Mérési hibák. F-próba, egymintás- és kétmintás t-próba alkalmazása, várhatóérték konfidencia intervallumának számítása. Variancia analízis alkalmazási lehetőségei mérési eredmények kiértékelésénél és kísérletek tervezésénél. Lineáris regresszió alapjai. Becslés a legkisebb négyzetek módszerével. Többváltozós statisztikai módszerek, diszkriminancia analízis, főkomponens analízis és cluster analízis alapjai, és felhasználási lehetőségei.

15. Az analitikai kémiai mérések minőségbiztosítása, akkreditáció. A minőségügy története. Az analitikai kémiai mérések minőségbiztosítása, akkreditáció, a minőségirányítási kézikönyv felépítése. Az ISO szabványrendszer, a TQM alkalmazása. Az analitika minőségbiztosításának jellemzői. Validálás, teljesítményjellemzők. A GLP, GMP alapelvei, követelményei. Az MSZ EN ISO/IEC 17025:2005 szabvány.

C-tantárgycsoport (szintetikus kémiai szakirány)

- 1.** A kémiai reakciók perturbációelméleti leírása. Sztereoelektron effektusok és megnyilvánulásai. Periciklusos reakciók fogalma, típusai, szintetikus jelentősége, az értelmezésükre alkalmazott módszerek áttekintése és összevetése.
- 2.** Szabad gyökök előállítása, szén-központú gyökök stabilitási viszonyai, reakcióik, az ezeket befolyásoló tényezők. Gyökreakciók szintetikus alkalmazása, gyökös és ionos reakciók összehasonlítása.
- 3.** Kinetikus aszimmetriás transzformációk fogalma és típusai. A legfontosabb királis kiindulási anyagok jellemzése („chiral pool”), szintetikus alkalmazásuk enantiomertiszta célvegyületek előállítására. Szubsztrát-, segédanyag-, reagens- és katalizátor-kontrollált aszimmetriás szintézisek, alapelvük és példák.
- 4.** Kinetikus és dinamikus kinetikus rezolválás. Többszörös sztereodifferenciálás. Legfontosabb aszimmetriás átalakítások (alkilezés, aldol-reakciók, oxidációk és redukciók, organokatalízis).
- 5.** Farmakológiai alapfogalmak, farmakokinetika és farmakodinámia. Gyógyszerhatások molekuláris alapjai, targetek, receptorális és nemreceptorális gyógyszerhatás. Agonizmus, antagonizmus. Az autonóm idegrendszer, a szív és érrendszer, a gyulladás farmakológiája. Központi idegrendszerre ható szerek.
- 6.** Paralel szintézisek, vegyületkönyvtárak. Oldat- és szilárdfázisú szintézismódszerek, előnyeik és hátrányaik. Gyantán kötött szubsztrátok, reagensek és segédanyagok. Robotizált szintézisek.
- 7.** Mikrohullámú aktiválás elmélete és alkalmazása. Mikrohullámmal aktivált oldat- és oldószermentes reakciók. Berendezések, alkalmazási technikák szerves kémiai szintézisekben. Az áramlásos kémia alapjai és alkalmazási lehetőségei.
- 8.** Korszerű 1D és 2D NMR módszerek a szerves vegyületek szerkezetének meghatározásában, szelektív TOCSY, szelektív NOE, Watergate, COSY, TOCSY, NOESY, ROESY, HSQC, HMBC.
- 9.** A kationos és anionos polimerizáció kinetikája és mechanizmusa. Az élő ionos polimerizáció gyakorlati alkalmazásai.
- 10.** A gyökös polimerizáció kinetikája és mechanizmusa (szabad gyökös, NMP és ATRP). Az élő gyökös polimerizáció gyakorlati alkalmazásai.
- 11.** Gázkromatográfok, kolonnatípusok, injektorok és detektorok. Kromatográfiai paraméterek meghatározása. Mennyiségi és minőségi analízis, GC-MS.
- 12.** Folyadékromatográfok, HPLC, GPC technikák. Kolonnatípusok, kolonna-technológia. Állófázisok kiválasztása. Izokratikus- és gradiens módszerek. Királis vegyületek elválasztása. Kromatográfiai paraméterek meghatározása.

13. A tömegspektrometria ionforrásai, tömeganalizátorok, detektorok. MALDI-TOF MS módszer alapjai és alkalmazásai: szintetikus és természetes polimerek móltömegének, móltömegeloszlásának, funkcionalitásának meghatározása.

14. Elektroporlasztásos ionizálási módszerek (ESI, APCI, APPI). Online (LC, GPC)-ESI MS. MALDI MS/MS és ESI-MS/MS (PSD, CID) módszerek és alkalmazásuk peptidek, oligoszacharidok és kis molekulatömegű vegyületek szerkezetének meghatározására.

D-tantárgycsoport (radiokémikus szakirány)

- 1.** Stabilis és radioaktív izotópok. A radioaktív bomlás típusai, a bomlás kinetikáját leíró törvények.
- 2.** A töltött részecskék, elektromágneses sugárzás és neutronok kölcsönhatása az anyaggal. A sugárzás és az anyag kölcsönhatásán alapuló analitikai módszerek csoportosítása a belépő és kilépő részecskék, ill. elektromágneses sugárzások alapján.
- 3.** Természetes radioaktív izotópok, ill. izotóparányok analitikai alkalmazásai földtörténeti, történeti korok meghatározásában és geológiai folyamatok vizsgálatában.
- 4.** Radioaktív nyomjelzés alapelvei. A nyomjelző kiválasztásának szempontjai. A radioaktív nyomjelzés alkalmazása a fizikai, az analitikai és szerves kémiában. Nyomjelzés ipari méreteken.
- 5.** A nukleáris energiatermelés: alapvető magreakció, atomerőmű elvi működése. Az atomenergia-termeléssel és a radioaktív hulladékkezeléssel kapcsolatos kémiai ismeretek.
- 6.** Nukleáris létesítmények környezeti hatásai. Nukleáris környezetellenőrzési eljárások: levegő-, talaj-, vízellenőrzési módszerek. Részecskegyorsítókra alapozott izotóp-előállítások és diagnosztikai vizsgálatok környezetvédelmi szempontjai.
- 7.** Neutronforrások, részecskegyorsítók és izotópgenerátorok szerepe a radioaktív izotópok termelésében. Neutronhiányos és neutrontöbblettel rendelkező izotópok előállítása.
- 8.** Kromatográfiás módszerek a radiogyógyszerek gyártásában és minőség-ellenőrzésében. A folyadék-, gáz- és planáris kromatográfia elvi alapjai és alkalmazási lehetőségeik a radioaktív izotóppal jelzett vegyületek kifejlesztésében és rutin jellegű gyártásában. HPLC, UPLC, HPLC-MS, GC, GC-MS, TLC, papírkromatográfia elve és gyakorlata. A kromatográfiás módszerek validálása, az analitikai berendezések kvalifikálása.
- 9.** A leggyakoribb statikus planáris gamma-kamerás vizsgálatok: alapelv, radiofarmakonok, leképező eszközök.
- 10.** A SPECT leképezés technikája és leggyakoribb alkalmazásai (szívizom-perfúzió, agy). A hybrid leképezés jelentősége.
- 11.** Dinamikus izotópdiagnosztikai eljárások: a gastrointestinalis rendszer és vesék funkcióinak izotópvizsgálatai. A vese-clearance mérése.
- 12.** A "klasszikus" PET izotópok előállítása. A legelterjedtebb PET radiofarmakonok és minőségellenőrzésük.
- 13.** A PET-CT-vel végzett vizsgálatok szerepe az onkológiában és a receptorkutatásban.
- 14.** Izotópterápiás radiofarmakonok és alkalmazásuk elvei.
- 15.** Az ionizáló sugárzás biológiai hatásai, sugárkárosodás megjelenési formái. A sugárveszélyes munka személyi és tárgyi feltételei, dóziskorlátok. Sugárvédelem nyílt radioaktív készítmények használatakor. Dózisfogalmak, a dozimetria eszközei.