

A Debreceni Egyetem Kémia Doktori Iskola képzési programja és kutatási területei

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 gyógyászatilag 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 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 Kémia 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, 2010-től pedig Dr. Gáspár Vilmos egyetemi tanár irányítja 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 Kémia 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 Kémia Doktori Iskola, 2013-tól napjainkig

A Kémia 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 Kémia Doktori Iskola jelenlegi programjai:

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

K/1 Program, Reakciókinetika és katalízis

Vezető: Dr. Joó Ferenc, akadémikus, egyetemi tanár

A programban résztvevő oktatók: Bazsa György, Bényei Attila, Gáspár Vilmos, Kathó Ágnes, Lente Gábor, Ósz Katalin, Póta György, Purgel Mihály, Rábai Gyula, Tóth Zoltán

Kutatási témák: Nemlineáris kémiai dinamikai jelenségek. Oldatreakciók mechanizmusa. Fémorganikus katalízis vizes közegben. Molekuláris katalizátorok heterogenizálása. Fotokémiai reakciók.

A program leírása: A program a több, mint negyven éves debreceni reakciókinetikai kutatások eredményeire épül. A program egyetemi kereteit jól kiegészíti a Fizikai Kémiai Tanszéken működő MTA-DE Homogén Katalízis és Reakciómechanizmusok Kutatócsoport.

A nemlineáris kémiai dinamika (reakciókinetika) témakörben tanulmányozzuk a homogén oldatban kialakuló oszcillációs reakciókat, amelyek közül kiemelkedő figyelmet szentelünk a pH-oszcillátoroknak. Fontos cél pH-oszcillációt mutató új rendszerek tervezése, dinamikai viselkedésük számítógépes modellezése, a gyakorlati felhasználás lehetőségeinek keresése. Az oszcillációs dinamika szabályozásának illetve vezérlésének lehetőségeit elsősorban olyan elektrokémia rendszerekben vizsgáljuk, melyeket korábban sikerrel alkalmaztunk különböző káoszszabályozási algoritmusok kidolgozására és a szinkronizáció mechanizmusának vizsgálatára. Fontos kutatási terület a térbeli struktúrák kialakulásához, a kémiai hullámok megjelenéséhez vezető feltételek feltárása és a térbeli jelenségek dinamikájának vizsgálata.

A homogén katalízis kutatások terén vizsgáljuk a vizes közegű fémorganikus katalízis feltételeit és alkalmazásait (pl. hidrogénezés, deuterálás, redoxizomerizáció, szén-szén kapcsolás), 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, ezek szintézise és jellemzése alapvető jelentőségű a kutatásokban. 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. Mind a homogén, mind a heterogén katalizátorokat felhasználjuk sejtmembránok hidrogénezés révén történő módosítására, a sejtmembránok fizikai állapota és funkciói közötti összefüggések tanulmányozására. Szorosan csatlakozik a programhoz a katalizátorok és termékek szerkezetvizsgálata, ezen belül az egykristály röntgendiffrakciós szerkezetvizsgálat. Ennek további területei: szupramolekuláris kémia, szerkezet-meghatározás pordiffrakciós adatokból, és a gyógyszer-hatóanyagok polimorfizmusának vizsgálata.

A fotokémia témakörben tanulmányozzuk a napenergia hasznosításának a lehetőségeit homogén vizes közegben. Ennek során a fotokémiai vízbontás, illetve hidrogénfejlesztés kinetikai vizsgálatát végezzük, katalizátorként különféle vízdoldható cérium(III)-komplexeket alkalmazva. A másik vizsgált katalizátorcsoport a szubsztituált 1,4-benzokinonok és származékaik, melyek szintén sokoldalú fotokémiával rendelkező vegyületek, ráadásul foto-oxidációjuk vagy -redukciójuk nem csak a szubsztituensekkel, hanem redoxi-aktív fémionok jelenlétével is befolyásolhatók. Ehhez kapcsolódóan ezen származékoknál nem csak a fotokémiai, hanem a redoxisajátságok részletes vizsgálata is szükségessé válik. A mechanizmuskutatások esetében kvantumkémiai számítási módszereket is bevetünk.

A Kémia 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:

Bazsa György, Gáspár Vilmos: Nemlineáris kémiai kinetika

Gáspár Vilmos: Kémiai káosz

Joó Ferenc: Komplexkatalizált szerves szintézisek

Póta György: A reakciókinetika matematikai és számítógépes módszerei

Póta György: A kémiai hullámok és térbeli szerkezetek

Bényei Attila: Röntgendiffrakciós szerkezetvizsgálat

Kathó Ágnes: Alternatív oldószerek a fémorganikus katalízisben

Tóth Zoltán: Alkalmazott tudástér elmélet

Purgel Mihály: Számítógépes molekulamodellelés

Tóth Zoltán: Kémia didaktika

Pápai Imre: Kvantumkémiai számítások

Tóth Zoltán: A didaktikai kutatás módszertana

Joó Ferenc: Homogeneous Catalysis in Industry (angol nyelven)

K/2 Program, Koordinációs és analitikai kémia

Vezető: Dr. Fábíán István, egyetemi tanár

A programban résztvevő oktatók: Baranyai Zsolt, Bodnár Ildikó, Braun Mihály, Brücher Ernő, Buglyó Péter, Farkas Etelka, Gáspár Attila, Gyémánt Gyöngyi, Huszánk Róbert, Kertész

Zsófia, Lázár István, Lente Gábor, Nagy Péter, Pap Lajos, Posta József, Sóvágó Imre, Tircsó Gyula, Tóth Imre, Vámosiné Kállay Csilla, 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. Szűrkevizék újrahasznosítása. Környezetanalítika új kapcsolt technikus műszeres módszerekkel. A mikrofluidika analitikai kémiai alkalmazásai. Környezetszennyezők meghatározása (humán)biológiai és környezeti mintákban. Nagyhatékonyságú mintabeviteli módszerek az atomspektroszkópiában. Elemspeciációs módszerek. Spektrofotometria.

A program leírása: A program két korábbi doktori program (koordinációs kémia és 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 előállítására és szerkezeti jellemzése komoly perspektívákat nyit új humán-gyógyászati alkalmazások kidolgozásában.

A bioszervetlen kémiai kutatások másik nagy területe egyes toxikus fémek (pl. Pb, Pd, Ce, Al, Ga, Tl, stb.) és az orvosdiagnosztikai vizsgálatokban fontos lantanoidák (pl. Gd, Tm, Yb, 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 képviselők kovalens kötéssel aerogél hordozóhoz rögzítése, új aerogél kompozitok előállítása, és a kapott új anyagok koordinációs kémiai, analitikai, kromatográfiai 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 előállítása, 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 funkcionális 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 köztermékek gyorskinetikai módszerekkel történő azonosítása, jellemzése és a helyes kinetikai modellek megalkotása. Végső 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 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; 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, vérszérum, 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 nyomelemlétszint 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 kötésiállapotú formáinak

elválasztására és az egyes formák nagyérzékenységű on-line vagy off-line detektálására. GC, HPLC és kapilláriselektroforézis (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 közelmúltban kezdődtek egy új analitikai módszer, a termoanalitika és az atomspektrometria egyesítésével létrejött spektrotermometria fejlesztési munkái. A módszer lehetővé teszi egyrészt a vegyületek termikus bomlási folyamatainak térben és időben történő szétválasztását és követését optikai módszerekkel, másrészt az adott elem különböző vegyületeinek a termikus különbségek alapján történő speciációs analízisét.

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

Tóth Imre: Koordinációs kémia

Fábián István: Gyorsreakciók kinetikája

Tircsó Gyula: Makrociklusos komplexek kémiája

Sóvágó Imre: Bioszervetlen kémia

Sóvágó Imre: Átmenetifémek koordinációs kémiája

Lázár István: Válogatott fejezetek a modern anyagtudományból

Nagy Péter: Redox kémia biológiai rendszerekben

Gyémánt Gyöngyi: Korszerű kromatográfiás eljárások

Pap Lajos: Környezetanalitika

Posta József: Atomabszorpciós spektrometria

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

Nagy Noémi: Radioanalitika és alkalmazása

Gáspár Attila: Kapilláris zónaelektroforézis

K/4 Program, Makromolekuláris és felületi kémia

Vezető: Dr. Kéki Sándor, egyetemi tanár

A programban résztvevő oktatók: Árpád István, Bányai István, Deák György, Kuki Ákos, M. Nagy Noémi, Nagy Zoltán, Novák Levente, Szűcs Zoltán, Zsuga Miklós

Kutatási témák: Tervezett tulajdonságú polimerek és kopolimerek szintézise. Fényemittáló és alakemlékező polimerek előállítása. Természetes és szintetikus polimerek jellemzése lágyonizációs tömegspektrometriával. Határfelületi reakciók vizsgálata agyagásványokon radioindikációval. Makromolekulás kolloidok és fém-komplexeik. Nagy- és kislebontású NMR alkalmazása porózus anyagok és gélek és szolok vizsgálatára.

A 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 fáziszeváráció 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, mezőgazdasági termékek ragasztására alkalmas ipari ragasztók tervezésével és előállításával; 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 oldékonyság javításának új lehetősége polimerek és hatóanyagok extrudálásával; a keletkező „szilárd oldatokban” a dermedés után kialakuló molekuláris diszperz rendszerek vizsgálata.

Kiterjedt kutatásokat folytatunk az intelligens polimer alapú rendszerek, úgymint fényemittáló és alakemlékező tulajdonságú polimerek, illetve kompozitok előállítása és karakterizálása területén. Kék szín emissziójára képes fenilént, fluorént, vagy tiofén, piridin, furán heterociklust tartalmazó homo- vagy különböző kopolimereket állítunk elő polikondenzációs reakciók segítségével. A fluoroforokra alkil-, alkoxi-, és aromás szubsztituenseket kapcsolva befolyásoljuk a polimerlánc planaritását, az emissziós spektrum alakját, az emissziós maximum helyét, és a polimer oldhatóságát is. Célunk olyan, kék fény emissziójára képes vegyületek előállítása, melyek szerves oldószerekben jól oldódnak, és elasztomer tulajdonságuk révén flexibilis hordozóra felvihetők. Nagy hangsúlyt helyezünk pontosan definiált szerkezetek létrehozására, az alapláncokra biológiai molekulákat (aminosavak, oligoszacharidok) építünk be, miáltal a LEP-ek biológiai hasznosíthatósága is lehetővé válik. Új típusú izoindol tartalmú kopolimereket állítunk elő, melyek közvetlenül fehérjékhez kapcsolhatók, kibővítve alkalmazhatóságukat a molekuláris detektálás területére is. Az alakemlékező polimerek területén témáink: poliuretán alapú kémiailag térhálósított alakmemória di és triblokk-kopolimerek előállítása. Rugalmas blokként, jól definiált, élő polimerizációval előállított funkcionális poliizobutilént és/vagy polietilén oxidot építünk be. A térhálós rendszerek mechanikai vizsgálata. Lehetőségek keresése biológiai felhasználásra és kompozitképzésre. Egymásbahatoló egyik fázisában térhálós (semi-IPN) rendszerek alakemlékező képességének vizsgálata, pl. poliuretán/epoxi (PU/EP) alapúak; erősítőanyagok bevitele a visszaalakulás során fellepő erő növelése érdekében.

Analitikai jellegű kutatásaink természetes és szintetikus polimerek modern lágyionizációs tömegspektrometriás módszerekkel történő karakterizálására irányulnak.

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 fémkomplexek 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. Célunk új, radioaktív izotóppal jelezhető aminosavszármazékok előállítására és stabilis komplexek kialakítása az orvosi képalkotó diagnosztikában alkalmazott ^{99m}Tc , ^{111}In , ^{67}Ga , illetve a terápiás értékű ^{153}Sm , ^{90}Y radionuklidokkal.

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}Na , ^{17}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

Kéki Sándor: Műanyagok

Kéki Sándor: Makromolekuláris kémia

Kéki Sándor: A molekulatömeg meghatározásának modern módszerei (SEC, MALDI MS)

Deák György: Modern folyadékkromatográfiás eljárások

Kéki Sándor: Modern tömegspektrometriás módszerek

Nagy Noémi, Kónya József: Határfelületi reakciók kőzeteken és talajokon

Kuki Ákos: Vegyipari folyamatok szimulációja

Kéki Sándor: Intelligens műanyagok

Árpád István: Dimenzióanalízis és hasonlóságelmélet

Novák Levente: Biokolloid rendszerek

K/5 Program, Szénhidrátok és heterociklusok kémiája és kémiai biológiája

Vezető: Dr. Somsák László, egyetemi tanár

A programban résztvevő oktatók: Antus Sándor, Barna Teréz, Batta Gyula, Bokor Éva, Borbás Anikó, Fekete Erzsébet, Fügedi Péter, Gyémánt Gyöngyi, Herczeg Mihály, Herczegh Pál, Juhász László, Juhászné Tóth Éva, Karaffa Levente, Kerékgyártó János, Kiss Attila, Kónya Krisztina, Kövér Katalin, Kurtán Tibor, Lázár László, Somogyi Árpád, Szilágyi László, Szurmai Zoltán, Vágvolgyiné Tóth Marietta

Kutatási témák: Természetes szénhidrátartalmú 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 természetes eredetű O-

heterociklusok (pl. flavonoidok, kromonoidok, kumarinok), kéntartalmú analógiák és O,N-heterociklusok szintézise, szelektív átalakításai és szerkezetvizsgálatuk.

A 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 sajátágaik 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 konjugátumai, 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) előállításai; mimetikumok (a természetben található anyagokkal szerkezetükben és/vagy hatásukban analóg vegyületek: pl. C-glikozil származékok, neoglikokonjugátumok, glikodendrimerek, vakcinák, bioizosztér vegyületek) készítése; 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; glikoenzimek kötőhely térképezése, aktív helyük és működési mechanizmusuk tanulmányozása; enzimkatalizált szintézisek; szénhidrát-fehérje kölcsönhatások vizsgálata tömegspektrometriás, ITC és NMR módszerekkel.

Benzo-kondenzált királis heterociklusok (pl. izokromán, kromán, 1,4-benzodioxán, benzoxazepin) sztereoselektív szintézise és további átalakításaik; a királis vegyületek sztereokémiájának, illetve a reakciók sztereoselektivitásának felderítése kombinált szerkezetvizsgálati módszerekkel (kiroptikai spektroszkópia, röntgendiffrakció, 2D NMR); többgyűrűs, kondenzált vagy áthidalt szerkezetű heterociklusok hatékony előállításának vizsgálata domino reakciókkal; speciális gyűrűzárési reakciók (pl. oxa-Pictet-Spengler, intramolekuláris oxa-Michael, hetero Diels-Alder) alkalmazása heterociklusos rendszerek kialakítására.

A program egyik kiemelt kutatási területe a 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); az előbbi módszerek alkalmazása természetben előforduló származékok előállítására; O-heterociklusok természetes vegyületekkel (aminosavak, peptidok, szénhidrátok, stb.) alkotott hibridjeinek keresztkapcsolásos reakciókkal végzett szintézise, sztereokémiai sajátosságai vizsgálata, a racemizációs folyamatok minimalizálása; több távozó csoportot tartalmazó szubsztrátumok reaktivitási (kemo- és regioszelektivitási) viszonyainak elemzése; O-heterociklusos vegyületek C-H aktiváláson alapuló keresztkapcsolási reakcióinak vizsgálata; biológiai aktivitással rendelkező (pl. SSAO inhibitor, HSP-koinduktor) 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:

Batta Gyula: Modern NMR módszerek elmélete

Somsák László: Reaktív indermedierek szénhidrátok anomer centrumán

Somogyi Árpád: Tömegspektrometriai alapismeretek, spektrumelemzések és alkalmazások biokémiai és biológiai kutatásokban

Herczeg Mihály: Véralvadásgátló vegyületek kémiája

Batta Gyula: NMR operátorképzés I. (gyakorlat)

Kövér Katalin: NMR operátorképzés II. (gyakorlat)

Gyémánt Gyöngyi, Barna Teréz, Kövér Katalin: Glikoenzimek

Kerékgyártó János, Szurmai Zoltán: Glikozilezési módszerek, oligoszacharidok szintézise

Vágvölgyiné Tóth Marietta: Glikomimetikumok

Kurtán Tibor: Haladó kiroptikai spektroszkópia

Herczegh Pál, Borbás Anikó: A kémiai biológia alapjai

Kónya Krisztina: Fémkatalizált keresztkapcsolási reakciók

Juhász László: Nagyhatékonyságú szintézismódszerek és szénhidrátkémiai alkalmazásuk

Somsák László: Nem ionos reakciók a szerves kémiában

Gyémánt Gyöngyi, Batta Gyula: Szénhidrátok analitikája és szerkezetvizsgálata

Borbás Anikó, Csávás Magdolna, Herczeg Mihály, Lázár László: Védőcsoport-manipulációk a szénhidrátkémiában

Juhászné Tóth Éva: A gyógyszerszintézisekben alkalmazott reakciók mechanizmusa

Kövér Katalin: NMR több dimenzióban

Gunda Tamás: Molekuláris gyógyszerkémia és gyógyszerkutatás

Somsák László: Bevezetés a szénhidrátkémiába

Bokor Éva: C-Glikozil vegyületek

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 KDI összehangolt fejlesztési programja eredményeként korszerű műszeres laboratóriumokat sikerült kialakítani. Az intézeti központi műszerpark legjelentősebb készülékei: Bruker Avance 360, Avance 400 és Avance II 500 MHz-es NMR-spektrométerek, Bruker Nonius MACH3 egykristály röntgen diffraktométer, Bruker MALDI-TOF és ESI-QTOF, ill. Pfeiffer kvadrupól tömegspektrométerek, MicroCal ITC200 titrációs kaloriméter, AR550 advanced reométer, Beckman J2-21M ultra-centrifuga, Paragon 1000 és Spectrum One FT-IR spektrométer 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 KDI 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 van 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). Arra törekszünk, hogy a doktori képzés három 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 és a kurzusok rövid leírása megtalálható, illetve elolvasható a Kémia Doktori Iskola honlapján összeállított adatbázisban: <http://www.chem.science.unideb.hu/Dkurzusok.html>

Az évenként megújuló *kutatási témakiírások* az Országos Doktori Tanács honlapján található meg: <http://www.doktori.hu/index.php?menuid=198&iID=4&diID=42&list=116>. (A DE Kémia Doktori Iskola azonosítója: 59). Több, mint két évtizedes tapasztalatunk az, hogy az érdeklődők, felvételizők közül sokan találnak szakmai céljaiknak megfelelő, izgalmas kutatási lehetőségeket a Kémia Doktori Iskola által kínált témák között.

A doktori hallgatók nyolc szemeszter alatt végzik el az értekezésük alapjául szolgáló kísérleti, illetve elméleti munkát. A Kémia Doktori Iskola elvárása, hogy a doktori értekezés témakörében legalább két, referált, és impakt faktoral rendelkező folyóiratban megjelent (DOI számmal rendelkező, vagy kefélyenyomatban 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 öt 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 Kémia 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 20 év közel 200 doktori fokozatot érdemelt ki a Kémia Doktori Program, majd később a Kémia Doktori Iskola keretében tanulmányaikat végző vagy oktatóink segítségével egyénileg felkészülő doktori hallgatóink.

A Kémia Doktori Iskola honlapja a <http://www.chem.science.unideb.hu/Doktisk.html> címen érhető el.

Debrecen, 2016. május 17.

Dr. Gáspár Vilmos
egyetemi tanár
a DE Kémia Doktori Iskola vezetője