

Magyar

Kémiai Folyóirat

Kémiai Közlemények

117. ÉVFOLYAM, 2011

2-3

A Magyar Kémikusok Egyesülete tudományos folyóirata
A Magyar Tudományos Akadémia Kémiai Osztályának közleményei
Magyar Kémiai Folyóirat 117. évfolyam, 2.-3. szám 41-152. oldal, 2011

Doktori képzés a Debreceni Egyetem Kémia Doktori Iskolájában

GÁSPÁR Vilmos*

Debreceni Egyetem, TTK, Fizikai Kémiai Tanszék, Egyetem tér 1, 4032 Debrecen, Magyarország

1. Bevezetés

A Kémia Doktori Iskola (KDI) a Debreceni Egyetem egyik legnagyobb és legeredményesebb doktori iskolája. A doktori (PhD) képzés céljai, keretei, kutatási programja és eredményei az alábbiakban foglalhatók össze.

Debrecenben a kémia oktatása és kutatása több évszázados múltra tekint vissza. A Református Kollégiumban már 1815-ben önálló kémiai tanszék működött. A modern értelemben vett kémiai kutatások közel kilenc évtizede kezdődtek az Orvosi Vegytani Intézetben, majd 1949-től – a Természettudományi Kar megalakulásával egyidőben – a *Tankó Béla* professzor vezetésével létrehozott Kémiai Intézet keretei között folytatódtak. Az egyetem szabályzata szerint magas színvonalú kutatómunkával egyetemi doktori címet, 1984-1993 között pedig egyetemi doktori fokozatot lehetett szerezni (mindkettő elnevezése „*Dr. Univ.*” volt). Ezt azonban nem alapozta meg a nyugati egyetemeken már akkor is elfogadott gyakorlatként alkalmazott iskolászerű, graduális képzés. Változást ebben, a jövő szakmai elitjének legmagasabb szintű képzését érintő fontos kérdésben is, mint annyi minden másban, a rendszerváltás hozott.

2. Kémia Doktori Iskola - a doktori képzés modern szervezeti kerete

Az 1993-ban történt akkreditációt követően a debreceni Kossuth Lajos Tudományegyetem, majd 2000-től az egyesült Debreceni Egyetem jogot nyert az új típusú doktori (PhD) cím adományozására kémia tudományából. A „Kémia Doktori Program” alapítója és első vezetője 1993-1996 között *Lipták András* volt. Az első Doktori Programtanács tagjai *Antus Sándor*, *Beck Mihály*, *Brücher Ernő*, *Pap Lajos*, *Sztaricskai Ferenc* és *Zsuga Miklós* voltak. A Doktori Program a Magyar Akkreditációs Bizottság (MAB) döntése alapján 2000 óta Kémia Doktori Iskola (KDI) néven működik. A Program, ill. az Iskola vezetője 1997-től 2009-ig *Joó Ferenc* volt, 2010-től *Gáspár Vilmos* irányítja a Doktori Iskola Tanács munkáját.

A KDI-ban nemzetközileg elismert, kiválóan felkészült, tapasztalt oktatók és kutatók dolgoztak, illetve dolgoznak, folyamatosan garantálva, hogy a doktori hallgatók korszerű, magas színvonalú képzésben részesüljenek. A KDI ötvennyolc tanára közül hárman akadémikusok, tizennyolcan az MTA, ill. atudományok doktorai. A KDI témavezetői közül a MAB minősítése alapján jelenleg huszonötön törzstagok: *Antus Sándor*, *Bányai István*, *Borbás Anikó*, *Brücher Ernő*, *Fábián István*, *Farkas Etelka*, *Gáspár Attila*, *Gáspár Vilmos*, *Joó Ferenc*, *Kathó Ágnes*, *Kéki Sándor*, *Kövér Katalin*, *Lázár István*, *Lente Gábor*, *Lipták András*, *Micskei Károly*, *Patonay Tamás*, *Rábai Gyula*,

Somsák László, *Sóvágó Imre*, *Szilágyi László*, *Tóth Imre*, *Tóth Zoltán*, *Várnagy Katalin* és *Zsuga Miklós*.

A doktori képzés infrastrukturális feltételei, a kutatások technikai, műszeres háttere (az ismert nehézségek ellenére) nemzetközi szinten is megfelelőek, hazai összehasonlításban kiemelkedő. A Kémiai Intézet és a KDI összehangolt fejlesztési programja eredményeként korszerű műszeres laboratóriumokat sikerült kialakítani. Az intézeti központi műszerpark legfontosabb készülékei: 360, 400 és 500 MHz-es NMR-spektrométerek, egykristály diffraktométer, MALDI-TOF, ESI-QTOF és kvadrupól tömegspektrométerek, reométer, ultracentrifuga, FT-IR spektrométerek és peptidszintetizátor. A folytonosan bővülő eszközállomány megteremtette és biztosítja annak a lehetőségét, hogy egy-egy tématerületet a legmagasabb tudományos szinten, a bemutatás és a használat lehetőségével oktathassunk.

A KDI kiterjedt nemzetközi kapcsolatait elsősorban az Iskola tanárai létesítették, de vannak az Iskola egészének, vagy a résztvevő oktatási és kutatási egységeknek is, szerződések keretében fenntartott nemzetközi együttműködései. Kihasználjuk az Erasmus program és a Marie Curie ösztöndíjak adta lehetőségeket és van példa francia-magyar közös PhD képzésre is. A felsoroltakon túl, a nemzetközi kapcsolattartás szinte valamennyi formája előfordul (TÉT és COST programok, MTA-NSF, -DAAD, -CNRS és más közös kutatások és ösztöndíjak). Arra törekszünk, hogy a doktori képzés három éve alatt lehetőleg valamennyi PhD hallgató részt vegyen külföldi tanulmányúton.

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. A szervezett képzés kezdete (1993) óta 231 hallgató vett részt a doktori programban. Közülük 168 abszolútoriumot, 138 pedig PhD fokozatot szerzett. Végzett hallgatóink közül sokan a debreceni, ill. más hazai egyetemeken és főiskolákon oktatnak és kutatnak. Öröm és büszkeségre okot adó (ám egyben fájó hiányt is előidéz), hogy a legjobbak közül jelentős számban jó nevű külföldi egyetemeken és kutatóintézetekben dolgoznak.

2.1. A doktori képzés célja

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.

*Tel.: +36-52512900, ext. 22389; fax: +36-52512915; e-mail: gaspar.vilmos@science.unideb.hu

2.2. Képzési kompetenciák

A doktori hallgató a fokozat megszerzésével képes lesz önálló kutatások végzésére, a szakirodalom alapján kutatásai megtervezésére és végrehajtására. Megismeri 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.

2.3. A képzés formái

A doktori képzés, a felsőoktatási törvénynek megfelelően, hat félév. A doktori hallgatónak 180 kreditpontot kell megszereznie, melyből 156 kutatási, 12-12 pedig tanulmányi, ill. oktatási kredit. Egy heti 2 órás, egy szemeszter időtartamú előadás (és vizsga) általában 2 kredit értékű, de tanulmányi kreditet lehet szerezni a tanszéki szemináriumokon elhangzó szakmai előadások rendszeres hallgatásával is. A hallgatók hat szemeszter során végzik el a doktori értekezésük alapjául szolgáló kísérleti, ill. elméleti munkát. Fontos követelmény, hogy a doktori munka alapján legalább 2-3 színvonalas tudományos közlemény jelenjen meg vagy nyerjen elfogadást a szakterület legjobban elismert, nemzetközi folyóirataiban.

Egy-egy szemeszterben jellemzően 25-30, államilag finanszírozott, nappali ösztöndíjas képzésben és öt-tíz levelező, ill. egyéni doktori képzésben részt vevő PhD hallgató tanul és kutat az Iskola keretében. Utóbbiak költségeit sokszor a munkahelyük (jellemzően gyógyszergyárak, vagy akadémiai intézetek) fizeti. Az Egyetem és a Richter Gedeon Nyrt. közötti szerződés keretében, az elmúlt három évben, kiváló hallgatóink közül évenként egynek az ösztöndíját a gyógyszercég fizette, kutatási támogatással kiegészítve.

3. Doktori programok és kutatási területek

A KDI keretében hat tudományos program működik:

3.1. Reakciókinetika és katalízis (K1)

Programvezető: Joó Ferenc.

A program oktatói: *Bazsa György, Bányai István, Béneyi Attila, Csajbók Éva, Gáspár Vilmos, Horváth Róbert, Kathó Ágnes, Nagy István, Ósz Katalin, Póta György, Rábai Gyula és Tóth Zoltán.*

Kutatási témák: Nemlineáris kémiai dinamikai jelenségek. Oldatreakciók mechanizmusa. Fémorganikus katalízis vizes közegben. Katalizátorok heterogénizálása. Heterogén katalízis.

A *K1 doktori program* (első vezetője *Beck Mihály*). Ez a program a több, mint negyvenéves debreceni reakciókinetikai kutatások eredményeire épül. A program egyetemi kereteit jól kiegészíti a Fizikai Kémiai Tanszéken működő MTA-DE Homogén Katalízis Kutatócsoport.

A nemlineáris kémiai dinamika (reakció-kinetika) témakörben tanulmányozzuk a homogén oldatban

kialakuló oszcillációs reakciókat, különös figyelmet fordítva a pH-oszcillátorokra. Fontos cél pH-oszcillációt mutató új rendszerek tervezése, dinamikájuk számítógépes modellezése, a gyakorlati felhasználás lehetőségeinek keresése. Az oszcillációs dinamika szabályzásának, ill. vezérlésének lehetőségeit főként 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 gyakorlati alkalmazhatóság lehetőségeit keressük a frontális polimerizációval nyert műanyag-fém, műanyag-grafit kompozitok mechanikai és elektromos vezetési tulajdonságainak tanulmányozásával.

A homogén katalízis kutatások terén vizsgáljuk a vizes közegű fémorganikus katalízis feltételeit és alkalmazásait (pl. hidrogénezés, deuterálás, redox izomerizáció, szén-szén kapcsolás), továbbá a szén-dioxid és a nitrogén-oxid homogénkatalitikus átalakításait. Oldható katalizátorként elsősorban tercier foszfin és *N*-heterociklusos karbén ligandumokat tartalmazó platinafém-komplexekeket alkalmazunk, ezek szintézise és jellemzése alapvető 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 módosítására hidrogénezéssel, és a sejtmembránok fizikai állapota és funkciói közötti összefüggések tanulmányozására. Szorosan csatlakozik a programhoz a katalizátorok és termékek szerkezetvizsgálata, ezen belül az egykristály-diffrakciós szerkezetvizsgálat. Ennek további területei: szupramolekuláris kémia, szerkezet-meghatározás pordiffrakciós adatokból, és a gyógyszer hatóanyagok polimorfizmusának vizsgálata.

Ezen a programon belül folynak a kémia alap- közép- és felsőfokú oktatásának didaktikai kérdéseivel foglalkozó kutatások. Kiterjedt elemzésekkel vizsgáljuk az oktatás szerepét az ifjúság, ill. 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 tudás-térelmélet és a szóasszociációs módszerek felhasználásával.

Doktori kurzusok:

Nemlineáris kinetika — Relaxációs módszerek — Röntgendiffrakciós szerkezetvizsgálat — Kémiai káosz — Alternatív oldószerek a fémorganikus katalízisben — Korszerű IR spektroszkópiai mérési módszerek (gyakorlat) — Korszerű IR spektroszkópiai módszerek — Komplexkatalizált szerves szintézisek — A reakciókinetika matematikai és számítógépes módszerei — A kémiai hullámok és térbeli szerkezetek — Oszcillációs kémiai

reakciók — Kutatásmódszertan — Alkalmazott tudástér elmélet — Kémia didaktika — A didaktikai kutatás módszertana

3.2. Koordinációs kémia (K2)

Programvezető: Sóvágó Imre.

A program oktatói: *Brücher Ernő, Buglyó Péter, Farkas Etelka, Fábrián István, Lázár István, Lente Gábor, Micskei Károly, Tircsó Gyula, Tóth Imre és Várnagy Katalin.*

Kutatási témák: Koordinációs kémiai kutatások bioszervetlen kémiai témakörökben. Orvosdiagnosztikai vizsgálatokban fontos lantanoidák komplexei oxigén- és nitrogéndonor polifunkciós ligandumokkal. Elemorganikus kémia. Összetett kinetikájú redoxi reakciók mechanizmusa.

A K2 doktori program (első vezetője *Brücher Ernő*). A program keretében folyó koordinációs kémiai kutatások legnagyobb területét a bioszervetlen kémiai témakörök képviselik. Ezen belül az egyik legkiterjedtebb kutatási terület a létfontosságú nyomelemek (Fe, Cu, Zn, Ni, Co, Mn, Mo) aminosavakkal, peptidokkal és származékaikkal alkotott komplexek 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 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 modellezése szükségessé tette, hogy a fentebb felsorolt ligandumok körében a vizsgálatok az elektrokémiai jellemzők meghatározására is kiterjedjenek. További új terület a bioaktív, félszéndvics Ru-hidroxamát komplexek előállításának és szerkezeti jellemzése, amelyek humán-gyógyászati alkalmazások kiindulópontját jelenthetik.

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 komplexek termodinamikai, kinetikai és szerkezeti jellemzése. A lehetséges ligandumok köre magába foglalja az aminosavakat és foszfátokat, valamint a különböző funkcionális makrociklusos poliaza-polikarboxilátokat. A program része továbbá új komplexképzők szintézise, kiválasztott képviselőik kovalens kötést aerogél hordozóhoz rögzítése, új aerogél kompozitok előállítása, és a kapott új anyagok koordinációs kémiai, analitikai, kromatográfiai és orvosbiológiai 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, ill. 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 intramolekuláris 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 funkciócsoportok 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)] részletes mechanizmusának feltárása is. Ezen belül alapvető cél a reakciók főbb törvényszerűségeinek és sztöchiometriájának megismerése, a képződő köztitermékek gyorskinetikai módszerekkel történő azonosítása és a helyes kinetikai modellek megalkotása.

Doktori kurzusok:

Komplexek szubsztitúciós reakcióinak kinetikája — Elem- és fémorganikus kémia — Komplexegyensúlyok kémiája — Gyorsreakciók kinetikája — Makrociklusos komplexek kémiája — Válogatott fejezetek a modern anyagtudományból — Organikus funkciócsoportok reakciói átmenetifémkomplexekkel — Bioszervetlen kémia — Átmenetifémek koordinációs kémiája — Koordinációs kémia

3.3. Műszeres és környezeti analitikai kémia (K3)

Programvezető: Fábrián István.

A program oktatói: *Braun Mihály, Gáspár Attila, Gyémánt Gyöngyi, Pap Lajos és Posta József*

Kutatási témák: Környezetanalítika új kapcsolt technikás műszeres módszerekkel. Környezetszennyezők meghatározása (human)biológiai és környezeti mintákban. Nagyhatékonyságú mintabeviteli módszerek az atom-spektroszkópiában. Elemspeciációs módszerek. Spektrofotometria.

A K3 doktori program (első vezetője *Pap Lajos*, akit *Posta József* követett). A program keretében a környezetanalítika témakörében gáz, folyadék és szilárd alkotók összetételét és kölcsönhatásait vizsgáljuk 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. Kutatásaink során a minták esszenciális, illetve toxikus nyomelemtartalmának, valamint kis koncentrációkban is potenciálisan biológiai hatású szerves komponenseinek analizálására kerül sor. Vizsgálataink 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 nyomelemháztartás közötti kapcsolat vizsgálata, vagy az agyagásványok, mint jelentős Ca-ioncserével rendelkező anyagok, ill. az általunk előállított Ca-tartalmú termékek, mint osteoporosis elleni gyógyhatású készítmények kutatása

a humángyógyászatban. Hasonlóan 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.

Kutatásaink felölelik nagyhatékonyságú mintabeviteli módszerek kidolgozását és optimalizálását az analitikai atomspektroszkópiában. E témakörben az impulzus, a flow injection (FIA) mintabevitel, a hidraulikus nagynyomású porlasztás (HHPN), az elektrotermikus elpárolgatás (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 minta-előkészítési eljárások (szeparálás, dúsítás), illetve kapcsolt technikákkal (GC/MS, LC/MS) történő meghatározási módszerek kidolgozása.

Új analitikai területnek számít a környezet- és nyomelem-analitikában az elem-speciációs módszerek bevezetése. Az esszenciális és toxikus nyomelemek összes koncentrációjának meghatározása mellett környezeti és biológiai minták esetén módszereket dolgozunk ki az adott nyomelem eltérő vegyértékű és kötésállapotú formáinak elválasztására és az egyes formák nagyérzékenységű online vagy off-line detektálására. GC, HPLC és kapilláris elektroforézis (CE), valamint elektrotermikus elpárolgatás (ETV) elválasztó módszereket nagy érzékenységű elemselektív detektorokkal: FAAS, GFAAS ICP/AES és ICP/MS módszerekkel kombinálva higany, ólom, arzén, króm stb. speciációs analízisét végezzük különböző eredetű mintákban.

2008-ban kezdődtek egy új analitikai módszer, a termoanalitika és az atomspektrometria egyesítésével létrejött spektrotermometria fejlesztési munkái. A módszer lehetővé teszi egyszerűen a vegyületek termikus bomlási folyamatainak térbeli és időbeli szétválasztását és követését optikai módszerekkel, másrészt az adott elem különböző vegyületeinek speciációs analízisét a termikus különbségek alapján.

Kutatásainkban jelentősek a mikrofluidikai eszközök és a funkcionizált aerogélek analitikai kémiai alkalmazásai is.

Doktori kurzusok:

Mintavétel és mintaelőkészítés — Induktív csatolású plazma atomemissziós spektrometria és környezeti alkalmazása — Kapillárelektroforetikus módszerek — Kapilláris zóna-elektroforézis — Mikrofluidika, lab-on-a-chip — Korszerű kromatográfiai eljárások — Röntgenfluoreszcencia — Radioanalitika és alkalmazása — Környezetanalitika — Környezeti minták előkészítése műszeres analízishez — Környezeti gáz, folyadék és szilárd minták analitikai módszerei — Korszerű műszeres analitikai eljárások szervetlen komponensek analíziséhez — Korszerű

műszeresanalitikai módszerek alkalmazása az iparban és kutatásban — Műszeres analitika — Speciációs analízis — Atomabszorpciós spektrometria — Mintabejuttatási módszerek az atom-spektrometriába — Atomspektroszkópiái módszerek

3.4. Makromolekuláris és felületi kémia (K4)

Programvezető: Kéki Sándor.

A program oktatói: Berka Márta, Deák György, Kuki Ákos, Nagy Noémi, Nagy Zoltán, Novák Levente és Zsuga Miklós

Kutatási témák: Tervezett tulajdonságú polimerek szintézise. Fényemittáló és mágneses polimerek. Polimerek jellemzése lágyionizációs tömegspektrometriával. Határfelületi reakciók vizsgálata agyagásványokon radioindikációval. Makromolekulás kolloidok fém-komplexei.

A K4 doktori program (első vezetője Zsuga Miklós) polimerekkel kapcsolatos, szerteágazó kutatásainak főbb célkitűzései a következők: a polisztirol-poliizobutilén-poli-sztirol blokk-kopolimer szintézise; a triblokk szilárd fázisban bekövetkező fázisszeparáció transzmissziós elektron mikroszkópos, különböző oldószerekben pedig fényszórás-fotometriával való vizsgálata; csillag-alakú polimerek előállítása; a dihidroxipoliizobutilén-K-alkoholát-jából, poli-laktiddal történő blokkolással biológiailag részben lebontható, új termoplasztikus anyagok szintézise; reciklált poliuretánok felhasználásával, mezőgazdasági termékek ragasztására alkalmas ipari ragasztók tervezése és előállítása; kenőolaj és kenőolajadalék tulajdonságú szintetikus makromolekuláris szénhidrogének előállítása és vizsgálata; biopolimerek szintézise genetikai tervezéssel; polipeptidek előállítása tervezett molekuláris paraméterekkel (molekulatömeg, konformáció, aminosav szekvencia) fermentációs úton, és azok kémiai módosítása; térhálósodó kopolimerek előállítása; egy- és többfunkciós vinilmonomerek polimerizációja; a háromdimenziós szerkezet kialakítása; nyújtott hatású és irányított hatóanyag-leadású gyógyszerformák kialakítása és a kioldódás vizsgálata; az így kialakított gyógyszerformák mikro- és makro-szerkezetének, a membránok viselkedésének, a diffúziós és ozmotikus viszonyok tanulmányozása; PAMAM dendrimerek oldatbeli szerkezetének és dinamikájának vizsgálata irányított és késleltetett hatóanyagleadás szempontjából; rosszul oldódó hatóanyagok biohasznosíthatóságának növelése; az eddig ismert módszerek mellett az oldékonyság javításának új lehetősége műanyag polimerek és hatóanyagok extrudálásával; a keletkező „szilárd oldatokban” a dermedés után kialakuló molekuláris diszperz rendszerek vizsgálata; gélek keletkezésének és finomszerkezetének vizsgálata fény-emittáló és mágneses tulajdonságú polimerek, ill. kompozitok előállítása és vizsgálata; polimer rendszerek jellemzése modern lágyionizációs MS módszerekkel.

A makromolekulás kolloidokkal kapcsolatos kutatások főbb célkitűzései: poliaminosav típusú polimerek előállítása és funkcionizálása részleges hidrofobizálása a harmadlagos struktúra módosítása céljából; a keletkezett ligandumok jellemzése és oldatbeli szerkezetének vizsgálata multinukleáris és multidimenziós NMR spektroszkópiával;

a makromolekulás ligandumok fém-komplexeinek oldatbeli egyensúlyai, szerkezete és dinamikája; a fémkomplexek alkalmazási lehetőségei környezetvédelmi, katalitikus és gyógyászati szempontból.

A határfelületi reakciók témakörben elsősorban radioindukációs 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 aminosav-származékok előállítása és stabilis komplexek kialakítása az orvosi képpalkotó diagnosztikában alkalmazott ^{99}Tc , ^{111}In , ^{67}Ga , illetve a terápiás értékű ^{153}Sm , ^{90}Y radionuklidokkal.

Doktori kurzusok:

A fényszórás fotometria elméleti alapjai és alkalmazása — Modern folyadékkromatográfias eljárások — A molekulatömeg meghatározásának modern módszerei (SEC, MALDI MS) — Modern MS módszerek — Radioanalitika — Határ-felületi reakciók kőzeteken és talajokon — Heterogén reakciók — Makromolekulák fémkomplexei — Biokolloid rendszerek — Műanyagok — Makromolekuláris kémia

3.5. Szénhidrátok kémiája és kémiai biológiája (K5)

Programvezető: Somsák László.

A program oktatói: Barna Teréz, Batta Gyula, Borbás Anikó, Fekete Anikó, Fügedi Péter, Gyémánt Gyöngyi, Juhász László, Kövér Katalin Kerékgyártó János, Lipták András, Somogyi Árpád, Szilágyi László, Szirmai Zoltán és Vágvölgyiné Tóth Marietta.

Kutatási témák: Természetes szénhidráttartalmú vegyületek és lényegi alkotóelemeik szintézise. Glikomimetikumok és enziminhibitorok tervezése és szintézise.

A K5 doktori program (első vezetője Sztaricskai Ferenc, akit Herczegh Pál követett) az elmúlt évtizedekben folytatott, nemzetközileg kiemelkedő színvonalú szénhidrát-kémiai kutatások eredményeire épül. A program egyetemi kereteit jól kiegészíti a Szerves Kémiai Tanszéken működő MTA-DE Szénhidrátkémiai Kutatócsoport.

A szénhidrátkémia kutatások főbb témakörrei: a természetes vegyülettípusok (pl. oligoszacharidok, glikoproteinek, glikolipidek), és/vagy lényegi alkotóelemeik (pl. *N*- és *O*-glikozilezett aminosavak, peptidek) előállítása; glikomimetikumok (a természetben található anyagok szerkezetükben és/vagy hatásukban analóg vegyületek: pl. *C*-glikozil származékok) és enziminhibitorok tervezése és szintézise, melyek a természetes folyamatokba való beavatkozás lehetőségét adhatják. További résztemák: a szénhidrátok védőcsoportjainak kidolgozása és 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. glikozid hidroláz, neuraminidáz, glikozil transzferáz, glikogén foszforiláz) inhibitorok tervezése és előállítása; glikoenzimek kötőhely térképezése, aktív helyük és működési mechanizmusuk tanulmányozása; enzimkatalizált szintézisek; szénhidrát-fehérje kölcsönhatások vizsgálata MS és NMR módszerekkel.

Doktori kurzusok:

Modern NMR módszerek elmélete — NMR operátorképzés I. és II. (gyakorlat) — Oligoszacharidok szintézismódszerei — Szénhidrátkémiai védőcsoport manipulációk — Szénhidrátok és származékaik tömegspektrometriája — Modern módszerek az oligoszacharidok és glikopeptidek szintézisében — MS alapismeretek, spektrumelemzések és alkalmazások biokémiai és biológiai kutatásokban — Reakciómechanizmusok a szerves kémiában I. és II — Reaktív indermedierek szénhidrátok anomer centrumán

3.6. Természetes eredetű heterociklusok és analógaik szintézise és szerkezetvizsgálata (K6)

Programvezető: Antus Sándor.

A program oktatói: Berényi Sándor, Juhászné Tóth Éva, Kövér Katalin, Kurtán Tibor, Szilágyi László és Patonay Tamás.

Kutatási témák: Májvédő antioxidáns és glikogén-foszforiláz inhibitor hatású *O*-heterociklusok szintézise, hatás-szerkezet összefüggések vizsgálata. Farmakológiailag aktív természetes flavonoidok, alkaloidok és analógaik szintézise és szerkezetvizsgálata. Szén-szén kötés kialakításának új módszerei.

A K6 doktori program keretében folyó kutatások a szerves kémia egyik leggyorsabban fejlődő területéhez fűződnek.

E kutatások felölelik az *O*- és *N*-heterociklusos kémia több területét, de elsősorban a potenciálisan bioaktív természetes eredetű flavonoidok és alkaloidok, valamint analógaik szintézisére és szerkezetvizsgálatára koncentrálódik. E területen a májvédő, antioxidáns és glikogénfoszforiláz inhibitor hatású *O*-heterociklusok szintézisével, hatás-szerkezet összefüggések vizsgálatával és dopaminerg hatású kodein és izokromán származékok szintézisével foglalkozunk. A biológiai hatású természetes heterociklusok és analogonjaik racionális szintézisének kidolgozása az alaptudományi jelentőségükön túlmenően – elsősorban a gyógyszeripari felhasználásuk révén – számottevő nemzetgazdasági jelentőségük lehet. Szén-szén kötés kialakításának új lehetőségeit is behatóan tanulmányozzuk.

Doktori kurzusok:

Heterociklusos vegyületek szerkezet-felderítése kiroptikai spektroszkópiával — Szén-szén kötés kialakulása a szerves kémiában — Szerves és biomolekuláris kémia újabb eredményei — A gyógyszer-szintézisekben alkalmazott reakciók mechanizmusa — Modern szintézismódszerek és stratégiák Szintónok, retroszintézis — NMR több dimenzióban — Drogok kémiája — Bevezetés a szénhidrátkémiába

A Kémia Intézetben folyó kutatások PhD témákban is beépülő, fontos részét képezik az NMR metodikai fejlesztések és alkalmazások. Ez a tevékenység, jellegénél fogva, nem köthető szorosan egy-egy doktori programhoz. Hasonlóképpen, a programok többségében fontos szerepe van a tömegspektrometriás elemzéseknek, az egykristály-diffrakciós szerkezetvizsgálatoknak és egyéb nagyműszeres mérés technikáknak.

4. Záró gondolatok

A folyóirat debreceni különszámában olvasható tudományos közlemények további, részletes betekintést nyújtanak az Iskola kutatási programjaiba. A bemutatott eredmények

nem születhettek volna meg a Doktori Iskola egykori és mai doktori (PhD) hallgatóinak munkája nélkül, amiért ezúttal is köszönettel tartozunk.

Mondják, a kémia lényege: „making and breaking bonds”. Reméljük, hogy doktori iskolánk bemutatásával sikerült új „kötéseket” létrehozunk, és felkeltettük az érdeklődést a doktori tanulmányok és képzés iránt.

Azoknak, akik további információkat szeretnének olvasni a Debreceni Egyetem Kémia Doktori Iskolájáról, vagy tájékozódni szeretnének a felvételi eljárásról és követelményekről, javasoljuk, hogy lapozzák fel a Doktori Iskola honlapját a következő webcímen:

<http://www.chem.science.unideb.hu/Doktisk.html>

PhD Program in Chemistry at the University of Debrecen, Hungary

In this article, Vilmos Gáspár, Director of the PhD Program in Chemistry at University of Debrecen, Hungary, gives a detailed account on the educational and research program of the internationally recognized graduate school. The PhD Program is based on a credit system: the students have to collect a total of 180 credit points in 3 years of graduate education. These credit points should be earned by research (156 points), completing graduate courses (12 points), and teaching undergraduate courses (12 points). The PhD degree is issued after a successful oral exam generally in the special topics of the graduate courses taken by the student and a successful open defence of the PhD dissertation (thesis). It is a general requirement that the results presented in a dissertation should be based on 2-3 research papers published previously in peer-reviewed, well respected international journals of high impact. In a given semester, the average number of PhD students varies between 30 and 40. The majority of students are supported by governmental fellowships; however, there is also a possibility to earn the degree based on a personal program sponsored by outside sources, e.g. major companies.

In the school, we offer graduate education in six different research areas:

1. Reaction kinetics and catalysis
2. Coordination chemistry
3. Environmental and instrumental analytical chemistry
4. Macromolecular and surface chemistry
5. Chemistry and biochemistry of carbohydrates
6. Synthesis and structure examination of heterocycles of natural origin and their analogs

The high level of research and education in the PhD Program is the result of the joint effort of 58 professors of the Chemistry Department. Three professors are full members of the Hungarian Academy of Sciences (HAS), while 18 professors hold DSc. degree from the HAS. Since the beginning of the organized graduate education at University of Debrecen (1993), 231 students participated in the graduate school; 168 students completed the research and educational program, and 138 PhD degrees have been issued.