

A TANTÁRGY ADATLAPJA

Molekuláris topológia

Egyetemi tanév 2026/2027

1. A képzési program adatai

1.1. Felsőoktatási intézmény	Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Kolozsvár
1.2. Kar	Kémia és Vegyészmérnöki Kar
1.3. Intézet	Magyar Kémia és Vegyészmérnöki Intézet
1.4. Szakterület	Kémia
1.5. Képzési szint	Alapképzés
1.6. Tanulmányi program/ Képesítés	Kémia / okleveles vegyész
1.7. Képzési forma	Nappali tagozott

2. A tantárgy adatai

2.1. A tantárgy neve	Molekuláris topológia			A tantárgy kódja	CLM1160
2.2. Az előadásért felelős tanár neve	Conf.Dr. Katona Gabriel				
2.3. A szemináriumért felelős tanár neve	Conf.Dr. Katona Gabriel				
2.4. Tanulmányi év	III	2.5. Félév	6	2.6. Értékelés módja	Évk. ellen.
2.7. Tantárgy rendszere	Választható			2.8. Tantárgy típusa	Szaktárgy

3. Teljes becsült idő (az oktatási tevékenység féléves óraszámja)

3. Fejlesztési és értékelési tevékenységek (az oktatási tevékenységek kiegészítője)					
3.1. Heti óraszám	4	melyből: 3.2. előadás	2	3.3. szeminárium/labor/projekt	2
3.4. Tantervben szereplő összóraszám	56	melyből: 3.5. előadás	28	3.6. szeminárium/labor	28
3.5 Az egyéni tanulmányi idő (ET) és az önképzési tevékenységekre (ÖT) szánt idő elosztása:					óra
3.5.1. A tankönyv, a jegyzet, a szakirodalom vagy saját jegyzetek tanulmányozása (ET)					25
3.5.2. Könyvtárban, elektronikus adatbázisokban vagy terepen való további tájékozódás					20
3.5.3. Szemináriumok/ laborok, házi feladatok, portfóliók, referátumok, esszék kidolgozása (nagyobb vagy egyenlő a tantárgy naptárában az ellenőrzési feladatokra előírt összórással)					14
3.5.4. Egyéni készségfejlesztés (tutorálás)					4
3.5.5. Vizsgák					6
3.5.6. Más tevékenységek: [pl.: kétirányú kommunikáció a tárgyfelelőssel/ tutorral]					0
3.7. Egyéni tanulmányi idő (ET) és önképzési tevékenységekre (ÖT) szánt idő összórássága				69	
3.8. A félév összórássága				125	
3.9. Kreditszám				5	

4. Előfeltételek (ha vannak)

4.1. tantervi	
4.2. kompetenciabeli	

5. Feltételek (ha vannak)

5.1. Az előadás lebonyolításának feltételei	<i>Prezentációkhoz szükséges technikai eszközök (számítógép, megfelelő szoftver, videóprojektor / interaktív tábla). A hallgatók minden előadás előtt kötelesek áttanulmányozni a rendelkezésükre bocsátott elektronikus tananyagot. A hallgatók kötelesek a kurzusokon mobiltelefonjaikat néma üzemmódban tartani.</i>
---	---

5.2. A szeminárium/ labor lebonyolításának feltételei	A szemináriumi és laboratóriumi foglalkozásokon való részvétel kötelező, a hatályos szabályzatnak megfelelően. A hallgatók kötelesek a szemináriumokon/laboratóriumi foglalkozásokon mobiltelefonjaikat néma üzemmódban tartani. Késés nem megengedett. A hallgatók kötelesek a laboratóriumba köpenyben, kesztyűben, védőszemüvegben és laboratóriumi törülközővel megjelenni. A hallgatók kötelesek betartani a munkavédelmi előírásokat. Minden laboratóriumi foglalkozás elején a hallgatók teszt kitöltésével igazolják a felhasznált anyagok kockázati tényezőinek és a biztonsági intézkedéseknek, valamint a laboratóriumi gyakorlatnak az ismeretét a rendelkezésre bocsátott szakirodalom alapján. A hallgatók nem hagyhatnak felügyelet nélkül működő berendezést. A laboratóriumi foglalkozás során a hallgatók kötelesek a megfigyeléseiket a laboratóriumi jegyzetfüzetbe rögzíteni. A laboratóriumi jegyzőkönyv leadása a félév elején meghatározott ütemezés szerint történik. Élelmiszer bevitel a laboratóriumba tilos.
---	--

6.1. A tanulmányi program elvégzése során elsajátított kompetenciák (a tantervből kell átvenni)¹

Szakmai kompetenciák	
Kompetencia kódja	Kompetencia
CP1	Alkalmazza a kémiai tudományos ismereteket új ismeretek vagy termékek fejlesztésére a minőség és az ellenőrzési folyamat javítása érdekében.
CP2	Tudományos módszereket alkalmaz a kémiai vegyületek összetételének, szerkezetének és fizikai-kémiai tulajdonságainak meghatározására.
CP6	Tudományos eredményeket kommunikál.
CP13	Elősegíti az innovációt és a tudástranszfert.
Transzverzális kompetenciák	
Kompetencia kódja	Kompetencia
CT1	A szakmai feladatok hatékony és felelősségteljes elvégzése a vonatkozó jogszabályok és a szakterületre jellemző etikai normák betartásával, szakképzett felügyelet mellett.
CT2	Tevékenységek végzése multidiszciplináris csapatban, interperszonális kommunikációs készségek alkalmazásával a kitűzött célok elérése érdekében.

6.2. A tanulmányi programra jellemző képzési eredmények (a tantervből kell átvenni)²

A tantárgy által megcélzott tanulási eredmények		
Kompetencia kódja	Ismeret és megértés (Knowledge and understanding)	Specifikus tudományos készségek (Specific academic skills)
CP1, CP2	A hallgató/végzős hallgató azonosítja és meghatározza/megmagyarázza a kémia alapvető fogalmait (általános, szervetlen, szerves, analitikai és fizikai kémia), amelyeket a szakirodalomban használnak.	A hallgató/végzős hallgató helyesen elemzi és értékeli a kémia alapvető fogalmait, alkalmazza az alapvető elméleteket és koncepciókat a kémiai rendszerek jellemzőinek leírására és értelmezésére.

¹ A tanulmányi program tantervéből át kell venni azokat a szakmai és/vagy transzverzális kompetenciákat, amelyek fejlesztéséhez az a tantárgy is hozzájárul, amelyhez az adott tantárgyi adatlap készült. Minden kompetencia esetében változatlan formában át kell venni a teljes kijelentést, beleértve a kompetencia kódját is, ahogyan a tantervben megjelenik. Amennyiben a két kategória közül valamelyikből nem vesznek át kompetenciákat, a táblázatban az adott kategóriának megfelelő sort törölni kell.

² Meg kell említeni a tanulmányi programra jellemző képzési eredményeket, amelyek fejlesztéséhez az a tantárgy is hozzájárul, amelyhez az adott tantárgyi adatlap készült. A tantárgy típusának (alaptárgy/szaktárgy/kiegészítő tárgy) megfelelő jellemzőket változatlan formában kell átvenni a tantervből, és a kapcsolódó kompetencia jobb oldalán kell feltüntetni.

CP17	A hallgató/végzős hallgató leírja a kémiai laboratóriumokban használt berendezések és műszerek alapelveit és működését.	A hallgató/végzős hallgató munkaprotokollokat dolgoz ki és elemzési jelentéseket készít, megoldásokat azonosít és alternatívákat fogalmaz meg a laboratórium/szakmai egység megfelelő működésének biztosítása érdekében.
CP1, CP13	A hallgató/végzős hallgató azonosítja és alkalmazza azokat a megfelelő információszerzési/dokumentációs módszereket, amelyek szükségesek a kémiai ismeretek megértéséhez és tudományos módon történő közvetítéséhez az érdeklődők felé.	A hallgató/végzős hallgató kiválasztja az információgyűjtés/dokumentáció legmegfelelőbb eredményeit, és azokat világosan és tömören közvetíti az érdeklődők felé.
CP2, CP6	A hallgató/végzős hallgató azonosítja és leírja azokat az alapvető és korszerű kísérleti technikákat, amelyeket a kémiai vegyületek analízisében és jellemzésében alkalmaznak.	A hallgató/végzős hallgató önállóan használja a klasszikus laboratóriumi eszközöket és a modern berendezéseket, kísérleteket tervez, valamint megfelelően értelmezi és elemzi a kapott eredményeket. A hallgató/végzős hallgató olyan tanulási helyzeteket tervez, amelyek a kémiai laboratóriumokra jellemző kísérleti technikák és módszerek fejlesztésére összpontosítanak.

7. Tárgy-specifikus tanulási eredmények (minden tantárgyfelelős a tanulmányi program szintjének kompetenciáit és tanulási eredményeit összefoglaló táblázatából vezeti be)

Ismeret és megértés (Knowledge and understanding)
A hallgató/végzős hallgató helyesen alkalmazza a kémia alapvető elméleteit és alapelveit oktatási és laboratóriumi környezetben.
A hallgató/végzős hallgató leírja a kémiai laboratóriumokban használt berendezések és műszerek alapelveit és működését.
A hallgató/végzős hallgató kiválasztja az információgyűjtés/dokumentáció legmegfelelőbb eredményeit, és azokat világosan és tömören közvetíti az érdeklődők felé.
Specifikus tudományos készségek (Specific academic skills)
CP1. A hallgató/végzős hallgató helyesen elemzi és értékeli a kémia alapvető fogalmait, alkalmazza az alapvető elméleteket és koncepciókat a kémiai rendszerek jellemzőinek leírására és értelmezésére.
CP2. A hallgató/végzős hallgató alkalmazza az analitikai kémia, szerves kémia, fizikai kémia, biokémia és anyagtudomány főbb fogalmait a kémiai gyakorlatban.
CP17. A hallgató/végzős hallgató helyesen és hatékonyan kezeli a kémiai laboratóriumok berendezéseit, kiválasztja a megfelelő analitikai eljárásokat a kémiai vegyületek vizsgálatához, értelmezi és rendszerezi a kapott eredményeket. A hallgató/végzős hallgató megfelelően választja ki a fizikai-kémiai paramétereket a kísérletek elvégzéséhez.

8. A tantárgy tartalma

8.1 Előadás	Didaktikai módszerek	Megjegyzések³
8.1.1. Bevezetés a graf elméletbe	Előadás. Magyarázat. Megbeszélés. Feladatmegoldás	2 óra hetente
8.1.2. Topológiai matrixok	Előadás. Magyarázat. Megbeszélés. Feladatmegoldás	2 óra hetente
8.1.3. Topológiai indexek	Előadás. Magyarázat. Megbeszélés. Feladatmegoldás	2 óra hetente
8.1.4. Szeged es Kolozsvari indexek	Előadás. Magyarázat. Megbeszélés. Feladatmegoldás	2 óra hetente
8.1.5. Reteg matrixok	Előadás. Magyarázat. Megbeszélés. Feladatmegoldás	2 óra hetente
8.1.6 Szimmetria es szimilaritas	Előadás. Magyarázat. Megbeszélés. Feladatmegoldás	2 óra hetente

³ Például szervezési szempontok, ajánlások a hallgatók számára, a kurzushoz/szemináriumhoz kapcsolódó konkrét szempontok, mint például a területen dolgozó szakemberek meghívása stb.

8.1.7. Magas foku szimmetriai szerkezetek	Előadás. Magyarázat. Megbeszélés. Feladatmegoldás	2 óra hetente
8.1.8. Neuronális hálózatok	Előadás. Magyarázat. Megbeszélés. Feladatmegoldás	2 óra hetente
8.1.9. Statisztikai elemek	Előadás. Magyarázat. Megbeszélés. Feladatmegoldás	2 óra hetente
8.1.10. QSPR modellek kvalitatív elemzése	Előadás. Magyarázat. Megbeszélés. Feladatmegoldás	2 óra hetente
8.1.11. QSAR modellek kvalitatív elemzése	Előadás. Magyarázat. Megbeszélés. Feladatmegoldás	2 óra hetente
8.1.12. Izomorfizmus és automorfizmus	Előadás. Magyarázat. Megbeszélés. Feladatmegoldás	2 óra hetente
8.1.13. Szén nanoszerkezetek	Előadás. Magyarázat. Megbeszélés. Feladatmegoldás	2 óra hetente
8.1.14. Grafok alkalmazásai a kémiában	Előadás. Magyarázat. Megbeszélés. Feladatmegoldás	2 óra hetente
Könyvészet		
1. M.V. Diudea, Topologie moleculară, Ed. Compres, 1995. 2. M. V. Diudea, (Ed.), <i>QSPR/QSAR Studies by Molecular Descriptors</i>, NOVA SCIENCE, New York, 2001., 438p. 3. M.V. Diudea; I. Gutman; L. Jäntschi, <i>Molecular Topology</i>, NOVA SCIENCE, New York, 2002., 329p. 4. O. M. Minailiuc and M. V. Diudea, TI-MTD Model. Applications in Molecular Design. In : M. V. Diudea, Ed., <i>QSPR/QSAR Studies by Molecular Descriptors</i>. NOVA SCIENCE, New York, 2001, pp. 363-388. 5. M. Dehmer (Ed.), K. Varmuza (Ed.), D. Bonchev (Ed.), F. Emmert-Streib (Series Ed.), <i>Statistical Modelling of Molecular Descriptors in QSAR/QSPR</i>, Wiley-Blackwell 2012 6. M. Karelson, <i>Molecular Descriptors in QSAR/QSPR</i>, 2000 7. I. Gutman (Ed.), B. Furtula (Ed.), <i>Novel Molecular Structure Descriptors - Theory and Applications, I and II</i>, University of Kragujevac, Kragujevac, Serbia, 2010		

8.2 Szeminárium/Labor	Didaktikai módszerek	Megjegyzések
Topológiai mátrixok felépítése	Megbeszélés. Magyarázat. Feladatmegoldás	2 óra hetente
Rétegmátrixok felépítése	Megbeszélés. Magyarázat. Feladatmegoldás	2 óra hetente
Indexek felépítése	Megbeszélés. Magyarázat. Feladatmegoldás	2 óra hetente
Bovított indexek felépítése	Megbeszélés. Magyarázat. Feladatmegoldás	2 óra hetente
Az adatok statisztikai elemzése	Megbeszélés. Magyarázat. Feladatmegoldás	2 óra hetente
Mono és többváltozós függvények	Megbeszélés. Magyarázat. Feladatmegoldás	2 óra hetente
QSPR	Megbeszélés. Magyarázat. Feladatmegoldás	2 óra hetente
QSAR kapcsolatok	Megbeszélés. Magyarázat. Feladatmegoldás	2 óra hetente
Kiterjesztett mátrixok tulajdonságokkal	Megbeszélés. Magyarázat. Feladatmegoldás	2 óra hetente
Szimmetrikus struktúrák megvalósítása	Megbeszélés. Magyarázat. Feladatmegoldás	2 óra hetente
Molekuláris hasonlóságok. Alkalmazások	Megbeszélés. Magyarázat. Feladatmegoldás	2 óra hetente
Neurális hálózatok. Alkalmazások	Megbeszélés. Magyarázat. Feladatmegoldás	2 óra hetente
Software felhasználásSzámítógépes programok használata	Megbeszélés. Magyarázat. Feladatmegoldás	2 óra hetente

Könyvészet

1. M.V. Diudea, Topologie moleculară, Ed. Compres, 1995.
2. M. V. Diudea, (Ed.), *QSPR/QSAR Studies by Molecular Descriptors*, NOVA SCIENCE, New York, 2001., 438p.
3. M.V. Diudea; I. Gutman; L. Jäntschi, *Molecular Topology*, NOVA SCIENCE, New York, 2002. , 329p.
4. O. M. Minailuc and M. V. Diudea, TI-MTD Model. Applications in Molecular Design. In : M. V. Diudea, Ed., *QSPR/QSAR Studies by Molecular Descriptors*. NOVA SCIENCE, New York, 2001, pp. 363-388.
5. M. Dehmer (Ed.), K. Varmuza (Ed.), D. Bonchev (Ed.), F. Emmert-Streib (Series Ed.), *Statistical Modelling of Molecular Descriptors in QSAR/QSPR*, Wiley-Blackwell 2012
6. M. Karelson, *Molecular Descriptors in QSAR/QSPR*, 2000
7. I. Gutman (Ed.), B. Furtula (Ed.), *Novel Molecular Structure Descriptors - Theory and Applications, I and II*, University of Kragujevac, Kragujevac, Serbia, 2010

9. Értékelés

Tevékenység típusa	9.1 Értékelési kritériumok ⁴	9.2 Értékelési módszerek ⁵	9.3 Aránya a végső jegyben
9.4 Előadás	Írásbeli	Vizsga	80%
9.5. Szeminárium / Labor	Írásbeli	Vizsga	20%
9.5 A teljesítmény minimumkövetelményei:			
• 5-ös (ötös) jegy • A laboratóriumi/szemináriumi jelenlét minimum 90%-ban feltétele a vizsgára bocsátásnak • A félév során készített digitális projekt bemutatása • Alapvető kompetenciák igazolása a kémiában alkalmazott digitális eszközök használatában			

10. SDG-ikonok (Fenntartható fejlődési célok/ Sustainable Development Goals)⁶

		A fenntartható fejlődés általános ikonja						
								
								Nem alkalmazható
								

Kitöltés időpontja:
17,04,2026

Előadás felelőse:

Szeminárium felelőse:

⁴ Az értékelési kritériumoknak közvetlenül tükrözniük kell a tanulmányi program és a tantárgy szintjén kitűzött képzési eredményeket. Pontosabban, a várható képzési eredményeknél felsorolt eredményeket értékelik.

⁵ Javasolt mind a végső kiértékelési módszerek, mind a folyamatos kiértékelési stratégia meghatározása.

⁶ Válasszon ki egyetlen olyan ikont, amely az [Egyetemi folyamatban történő alkalmazására vonatkozó eljárás](#) szerint legjobban illeszkedik az adott tantárgyhoz. Ha a tantárgy általánosságban foglalkozik a fenntartható fejlődéssel (pl. bemutatja/bevezeti a fenntartható fejlődés általános kereteit stb.), akkor a Fenntartható Fejlődés általános ikonja rendelhető hozzá. Ha egyetlen ikon sem vonatkozik a tantárgyra, válassza az utolsó opciót: „Nem alkalmazható”.

Az intézeti jóváhagyás dátuma:
27,04,2026

Intézetigazgató: Prof. dr. ing. PAIZS Csaba

A handwritten signature in blue ink, appearing to read 'Paizs', written in a cursive style.