

Az Általános és Fizikai Kémia Tanszék

'Gyenge molekuláris kölcsönhatások' csoportban

meghirdetett TDK, diplomadolgozati és szakdolgozati témák

Érdeklődni lehet az alábbi elérhetőségeken:

Dr. Kunsági-Máté Sándor (kunsagi@gamma.ttk.pte.hu, 24208)

Dr. Lemli Beáta (blemli@gamma.ttk.pte.hu, 24802)

Mikotoxinok gazda-vendég típusú kölcsönhatásainak tanulmányozása

A mikotoxinok különböző penészgombák anyagcserefolyamatainak káros hatású melléktermékei. A gombák által termelt mérgeanyagoknak látszólag nincs szerepük a gomba metabolizmusában, azonban potenciális veszélyforrást jelentenek a növényekre és állatokra, továbbá a táplálékláncba bejutva az emberre is. Biológiai hatásuk rendkívül szerteágazó; elsősorban vese-, és májkárosító sajátságuk kiemelkedő, valamint egyes származékok karcinogén tulajdonsággal is rendelkeznek. Nemcsak állati takarmányban találhatók meg, hanem számottevő mennyiségben fellelhetők például gabonafélékben, tejben, babban, fűszerekben vagy gyümölcslevegekben is. Élelmiszerbiztonsági szempontból igen fontos tehát a mikotoxinok szelektív és megfelelően érzékeny kimutatása, lehetőség szerint a szennyezett élelmiszer toxinmentesítése. A bioélelmiszerek egyre népszerűbbé válásával nem meglepő módon a különböző mikotoxinok kimutatására alkalmas módszerek fejlesztése napjainkban a tudományos érdeklődés középpontjába került. Ezen törekvések egy része olyan gyenge kölcsönhatások tanulmányozására irányul, amelyek során egy vegyület a kimutatandó mikotoxinnal kölcsönhatásba lép, és a folyamat során lehetőség van a képződő komplex koncentrációjával arányos és jól mérhető jel detektálására. A jelölt feladata kémiai érzékelőkben széleskörűen alkalmazott makrociklusos vegyületcsoportba tartozó molekulák közül egy mikotoxin, például az aflatoxin, az ochratoxin A, a patulin, a zearalenon vagy a citrinin kimutatására potenciálisan alkalmas vegyület azonosítása. Ennek során a jelölt a makrociklusos vegyület és a mikotoxin komplexképződését meghatározó gazda-vendég típusú kölcsönhatás molekuláris háttérfolyamatait vizsgálja különböző permittivitású oldószerekben és oldószer elegyekben. Munkája során a jelölt megismerkedik a fluoreszcenciás, fotometriás, Raman spektroszkópiás valamint kalorimetriás mérési módszerekkel és elméleti kémiai számításokkal.

témavezető: Dr. Lemli Beáta

Egyes mikotoxinok és polifenol származékok kompetitív kölcsönhatása szérum albumin molekulákkal eltérő molekuláris környezetben

A mikotoxinok különböző penészgombák anyagcserefolyamatainak káros hatású melléktermékei. A gombák által termelt mérgeanyagoknak látszólag nincs szerepük a gomba metabolizmusában, mégis potenciális veszélyforrást jelentenek a növényekre és állatokra, továbbá a táplálékláncba bejutva az emberre is. Biológiai hatásuk rendkívül szerteágazó; elsősorban vese-, és májkárosító sajátságuk kiemelkedő, valamint egyes származékok

karcinogén tulajdonsággal is rendelkeznek. Nemcsak állati takarmányban találhatók meg, hanem számottevő mennyiségben fellelhetők például gabonafélékben, tejben, babban, fűszerekben vagy gyümölcslevegekben is. Elsősorban élelmiszerekkel az élő szervezetekbe jutó mikotoxinokat napjainkban széleskörű érdeklődés övezi. E vegyületek molekulái az emberi és állati fehérjékkel történő kölcsönhatásuk tekintetében egymással és számos polifenollal kompetitív sajátságot mutatnak. Mind magát a toxin-fehérje kölcsönhatást, mind pedig a kompetitív jelleget a molekuláris környezet jelentősen befolyásolja; utóbbi az élő szervezetben rendkívül bonyolult, teljeskörű leírására jelenleg nincs remény. A jelölt feladata egy meghatározott mikotoxin – polifenol – albumin rendszerben a kompetíciót befolyásoló domináns folyamatok felkeresése és ezek kvantitatív leírása. Ennek érdekében a jelölt a mikotoxin-albumin, polifenol-albumin és mikotoxin-polifenol-albumin kísérleti (fluoreszcenciás, fotometriás, Raman spektroszkópiás valamint kalorimetriás) és elméleti kémiai módszerekkel történő tanulmányozását végzi.

témavezető: Dr. Lemli Beáta

Szén nanoszerkezetek felhasználása szenzormolekulák immobilizálására

Napjainkban előtérbe kerültek a szén újonnan felfedezett módosulatai (fullerének, szén nanocsövek, grafének, grafén nanoszalagok), ezek tulajdonságainak megismerése és a bennük rejlő potenciál kiaknázása a jövő feladata. Egyes szén nanoszerkezetek, mint például szén nanocsövek, ill. grafén rétegek elektromos és mechanikai tulajdonságai lehetővé teszik e rétegek optikai és elektrokémiai eszközökben történő széleskörű alkalmazását. E szerkezetek szelektív érzékelésre, ill. ennek megfelelő jelképzésre képes molekulákkal történő kovalens funkcionálásával olyan eszközök nyerhetők, melyek a természetes vizek összetett mátrixában a jelenleg rendelkezésre álló eszközöknél pontosabb környezeti kémiai és más analitikai méréseket tesznek lehetővé. A semleges aromás molekulák szelektív kimutatása nemcsak környezetvédelmi, hanem élelmiszer- és gyógyszerkémiai, valamint elválasztástudományi szempontból is nagy jelentőségű napjainkban. A jelölt feladata egy funkcionizált szén nanocső és egy semleges aromás molekula komplexképződése során kialakuló gyenge kölcsönhatás molekuláris háttérfolyamatainak vizsgálata különböző permittivitású oldószerben és oldószer elegyekben. Ennek érdekében a jelölt a komplexképződés kísérleti (fluoreszcenciás, fotometriás, Raman spektroszkópiás valamint kalorimetriás) és elméleti kémiai módszerekkel történő tanulmányozását végzi.

témavezető: Dr. Lemli Beáta

Szén nanocsövek oldhatóságának növelése aromás szegmenset tartalmazó hordozó molekulákkal

Napjainkban előtérbe kerültek a szén újonnan felfedezett módosulatai - fullerének, szén nanocsövek, grafének, grafén nanoszalagok – melyek tulajdonságainak feltárása és a bennük rejlő potenciál kiaknázása a jövő feladata. A szén nanocsövek előnyei által megkívánt széleskörű felhasználást például csökkenti, hogy gyakorlatilag semmilyen oldószerben nem oldódnak. Ezért igen nagy az igény az eltérő karakterű oldószerben oldható szén

nanocsövekre. Az oldhatóság növelése elérhető a csövek kovalens kötással történő származékképzésével, illetve fizikai módosítással létrejövő nem-kovalens kötéssel alapuló gyenge kölcsönhatás segítségével is. Ez utóbbi előnyösebb, mivel nem hoz létre változást a nanocső szerkezetében, ezáltal annak tulajdonságai sem változnak és a kölcsönhatás megszüntetésével a szén nanocsövek változatlanul visszanyerhetők. Az elképzelések szerint szén nanocsővel ilyen módon kölcsönható molekula egy aromás és egy nem aromás részből áll. Az aromás rész és a szén nanocső aromás gyűrűi között gyenge, általában π - π típusú kölcsönhatás jön létre, míg szén nanocsövek oldódását az oldó anyagon található hidrofíil rész teszi lehetővé dipoláris oldószerekben, például a vízben vagy az alkoholokban, illetve hidrofób rész az apoláris oldószerekben. A jelölt feladata szén nanocső és aromás szegmenset tartalmazó hordozó molekula komplexképződése során kialakuló gyenge kölcsönhatás molekuláris háttéranyagainak vizsgálata különböző permittivitású oldószerekben és oldószer elegyekben. Ennek érdekében a jelölt a komplexképződés kísérleti (fluoreszcenciás, fotometriás, Raman spektroszkópiás valamint kalorimetriás) és elméleti kémiai módszerekkel történő tanulmányozását végzi.

témavezető: Dr. Lemli Beáta

Ionfolyadékok poláris és apoláris oldószerekkel alkotott elegyeinek tanulmányozása

Széleskörű alkalmazási lehetőségeiknek és kedvező környezeti tulajdonságaiknak köszönhetően az elmúlt néhány évben az ionfolyadékok a figyelem középpontjába kerültek. Ezek a 100 °C-on és annál alacsonyabb hőmérsékleten folyadék halmazállapotú, ionos összetételű anyagok legtöbbször egy szerves kationból és egy ahhoz csatlakozó szerves vagy szervetlen anionból állnak. Az ionfolyadékok gyakorlati felhasználása szempontjából egyre nagyobb az igény különböző oldószerekkel, pl. alkoholokkal, vízzel vagy éppen hexánnal alkotott elegyei gyakorlatilag fontos sajátságainak felderítésére és leírására. Ezen vegyületek számos sajátsága, például viszkozitás, polaritás, elektrokémiai és szolvatációs viselkedés megváltozik, társoldószer hozzáadása következtében. Mindemelllett a tiszta ionfolyadék rendezett szerkezete is módosul a kation, illetve az anion és a társoldószer közötti intermolekuláris kölcsönhatások révén. A jelölt feladata az oldhatóság szempontjából eltérő természetű anyagok ionfolyadék komponens is tartalmazó oldószer-elegyeiben történő egyidejű oldásának elősegítése. Ennek érdekében a jelölt ionfolyadékok egyes társoldószerekkel alkotott elegyeinek kísérleti (fluoreszcenciás, fotometriás, Raman spektroszkópiás valamint kalorimetriás) és elméleti kémiai módszerekkel történő tanulmányozását végzi.

témavezető: Dr. Lemli Beáta

Szén nanocső – ionfolyadék kölcsönhatás tanulmányozása

Napjainkban előtérbe kerültek a szén újonnan felfedezett módosulatai - fullerének, szén nanocsövek, grafének, grafén nanoszalagok – melyek tulajdonságainak feltárása és a bennük rejlő potenciál kiaknázása a jövő feladata. A szén nanocsövek előnyei által kínált széleskörű felhasználást például csökkenti, hogy gyakorlatilag semmilyen oldószerben nem oldhatók vagy

diszpergálhatók. Az egy- és többfalú szén nanocsövek egyik lehetséges oldószercsoportját az ionfolyadékok alkotják. Ezek a 100 °C-on és annál alacsonyabb hőmérsékleten folyadék halmazállapotú, ionos összetételű anyagok legtöbbször egy szerves kationból és egy ahhoz csatlakozó szerves vagy szervetlen anionból állnak. Széleskörű alkalmazási lehetőségeiknek és kedvező környezeti tulajdonságaiknak köszönhetően az elmúlt néhány évben az ionfolyadékok a figyelem középpontjába kerültek. Így nem meglepő, hogy a szenzorkémiai kutatások során is előszeretettel alkalmazott különleges oldószercsoportban oldott szén nanoszerkezetek iránti igény felmerült, hiszen például szén nanocsövek, ill. grafén rétegek elektromos és mechanikai tulajdonságai lehetővé teszik e rétegek optikai és elektrokémiai eszközökben történő széleskörű alkalmazását. Az ionfolyadékokban diszpergált szén nanocsövek gélszerű anyagot eredményeznek, mely számos kedvező tulajdonsággal rendelkezik. Gyakorlati alkalmazhatóságuk szempontjából elengedhetetlen ugyanakkor ezen „bucky gel”-nek is nevezett lágy összetett anyagok fizikai és kémiai tulajdonságaik pontosabb ismerete, melyek közül az egyik legfontosabb a sajátos szerkezetük. Ennek érdekében a jelölt különböző összetételű szén nanocső - ionfolyadék rendszerek kísérleti (fluoreszcenciás, fotometriás, Raman spektroszkópiás valamint kalorimetriás) és elméleti kémiai módszerekkel történő tanulmányozását végzi.

témavezető: Dr. Lemli Beáta