

Fajka Lilla (ELTE Eötvös József Collegium)

Fotoaktív farmakofór vegyületek előállítása és vizsgálata

A fragmens alapú gyógyszertervezés előnye, hogy viszonylag kis számú molekula segítségével a kémiai teret jobban le lehet fedni, valamint nagyobb a hatékonysága a korai felfedező fázisban a nagy áteresztőképességű szűrésekhez képest. Ennek a módszernek a hatékonysága tovább növelhető, ha validált fragmens farmakofór megközelítéssel is kiegészítjük.

Ha a fragmensméretű kismolekulákra olyan egységet rögzítünk, amely fénybesugárzás hatására aktiválódik és kovalens kötést létesít a vizsgált fehérjecélponttal, akkor olyan fragmensméretű vegyületeket kaphatunk, amelyek másodrendű kölcsönhatások segítségével képesek azonosítani a kötőhelyet, majd ezt követően fénybesugárzás hatására kovalens módon rögzülnek.

Ezzel a módszerrel nemcsak új fragmens méretű kiindulópontokat nyerhetünk, de új, eddig még fel nem fedezett kötőhelyek azonosítására is lehetőség nyílik akár olyan nehéz fehérjecélpontok esetében is, amelyeknek nincs ismert célozható kötőhelye. A kutatócsoportunkban megalkottak ezen megközelítés segítségével egy 100 tagú vegyülettárat, amelyet egy onkológiai célponton, a KRAS-on sikeresen teszteltek.

Kutatásom célja a fenti vegyülettár ismételt előállítása, ha szükséges, a szintézis optimalása, valamint a vegyülettár tesztelése STAT5B (Signal transducer and activator of transcription 5B) fehérjén. Ez a fehérje a JAK-STAT útvonalon található, dimerizáció hatására aktiválódik, amely befolyásolja a proliferációt, apoptózist és differenciálódást, ezáltal olyan betegségek kialakulásához vezet, mint a leukémia, illetve különböző autoimmun megbetegedések. A STAT fehérje működésének befolyásolására jelenleg nincs szabadalmaztatott gyógyszer, valamint kovalens gátlása is kihívásnak bizonyult, mivel nincs támadható cisztein a dimerizációban szerepet játszó SH2 doménen.

Fehér Zsolt (SZTE Móra Ferenc Szakkollégium)

Versenyképes algoritmus az online minimális csúcsidőpont ütemezési problémára

Ebben a problémában (továbbiakban MPAS) egy érkező időpontfoglalási sorozatunk van, melyek közül mindegyik rendelkezik saját időtartammal. A cél az időpontok online ütemezése, és az ebből fakadó csúcskihasználtság minimalizálása az ütemezési intervallumban. Ebből fakadóan az MPAS széles körű alkalmazhatósággal rendelkezik főként, ahol korlátozott kapacitású erőforrás áll a rendelkezésünkre. Például, képzeljünk el egy vizsgálati központot,