

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,

adott számú orvosi szobával. Tegyük fel továbbá, hogy a nap folyamán folyamatosan érkeznek a páciensek időpont foglalásai különböző vizsgálatokra és kezelésekre, melyeket a beérkezés pillanatában kell beosztanunk, figyelembe véve az előre meghatározott időtartamukat és a rendelkezésre álló szabad idő-sávokat.

Az MPAS probléma offline verziója megegyezik a jól ismert ládapakolási feladattal. Ebben az a feladatunk, hogy különböző hosszúságú tárgyakat pakoljunk egységnyi méretű ládába úgy, hogy minimalizáljuk a felhasznált ládák számát. Hogy párhuzamot vonjunk a két feladat között, a fenti időpont-ütemezési példában a szobák felelnek meg ezeknek a ládáknak. Akárhogy is, az offline problémákkal ellentétben, az online ládapakolási feladat és az online MPAS feladat nem azonos. A különbség az, hogy míg a ládapakolásnál, ahol az elpakolt tárgyat már nem rakhatjuk át egy másik ládába, addig az MPAS probléma esetén, ahol az időpontok időintervallumokba vannak rendezve, rendelkeznek bizonyos rugalmassággal aszerint miként pakoljuk ezeket az időintervallumokat a szobákba. Érdekes algoritmikus kérdés tehát az, hogy ez a rugalmasság biztosít-e nagyobb teljesítményt.

Ferencz Kamilla (SZTE Móra Ferenc Szakkollégium)

Heteromorf termések: csak csírázási stratégiájukban különböznek vagy befolyásolják a felnőttkori rátermettséget is?

A termésheteromorfizmus azt jelenti, hogy egy növényegyed több típusú termést hoz létre, melyek morfológiailag és ökológiailag is jelentősen különböznek egymástól. Leginkább terjedési képességükben és csírázási gyorsaságukban mutattak ki különbséget a terméstípusok között. Eddig 18 zárwatermő családból jeleztek heteromorf fajokat, leginkább a fészkesek (*Asteraceae*) és a libatopfélék (*Chenopodiaceae*) családjában. Feltételezik, hogy a heteromorf termések a változatos és kiszámíthatatlan környezetű élőhelyeken előnyösek, mint például sivatagokban vagy sós mocsarakban. Kutatásunkban azt vizsgáltuk, hogy (1) az eltérő terméstípusok valóban különböző csírázási stratégiákat takarnak-e, hogy (2) mutatható-e ki különbség az eltérő termésekből kinevelt felnőtt növények esetén is, valamint (3), hogy közelrokon fajok esetén hasonló módon nyilvánul-e meg a termésheteromorfia. Ehhez a fészkesek családjába tartozó négy növényfaj magjait gyűjtöttük be, csíráztattuk, majd kineveltük a növényeket, teszteltük allokációs stratégiájukat és fenotípusos plasztikusságukat. Egyértelműen kimutattuk az eltérő termések különböző viselkedését mind a csírázás, mind a felnőttkori rátermettség szintjén, sőt, érdekes módon, a közelrokon fajok hasonló terméstípusai között is szignifi-