

Tóth Petra (SZTE Móra Ferenc Szakkollégium)

A $\text{Cl} + \text{CH}_3\text{CN}$ reakció dinamikájának elméleti modellezése

A kémia egyik fő célja a reakciók mechanizmusának megértése a legmélyebb atomi és molekuláris szinteken. Erre az elméleti számolások sokszor alkalmassabbak, mint a kísérleti módszerek, hiszen a szimulációk által nem csak a termékeket tudjuk detektálni, hanem gyakorlatilag lépésről lépésre követhetők a reakciók, valós időben vizsgálható az atomok mozgása, kötések keletkezése, vagy éppen felbomlása. Meghatározható, hogy milyen reakció utakon lehetséges a folyamat lejátszódása, milyen termékek keletkezhetnek, illetve ezek mekkora valószínűséggel. Ha ezeket ismerjük, akkor akár befolyásolni is tudjuk a reakciót a számunkra kedvező irányba.

Én a $\text{Cl} + \text{CH}_3\text{CN}$ reakció dinamikájának vizsgálatát tűztem ki célul. Ennek első lépéseként egy potenciálisenergia-felületet fejlesztünk, amely a Schrödinger-egyenlet numerikus megoldásából adódik. Ennek a felületnek a meredeksége adja az erőket, amelyek az atommagokat mozgatják egy reakció során. Az atomok mozgása a kváziklasszikus trajektória módszerrel számolható. Meghatározzuk a lehetséges termékeket, illetve azok képződésének valószínűségét is.

Hampuch Péter (PTE TTK Szentágotthai János Protestáns Szakkollégium)

Bakteriofágok gyakorlati alkalmazásának lehetőségei és korlátai

Bevezetés: A *Klebsiella pneumoniae* (Kp) baktérium által okozott fertőzések világszerte problémát jelentenek, elsősorban a kórházi környezetekben. Az izolátumok közt egyre nagyobb arányú a multidrog-rezisztencia (MDR) és ezen belül a karbapenem rezisztencia (CP) jelenléte, mely komoly klinikai kihívást jelent. A bakteriofág (fág) terápia a MDR-bakteriális fertőzések egyik alternatív kezelési módszere lehet, amelyet azonban a *K. pneumoniae* esetében nehezít a tok antigének nagymérvű variabilitása.

Anyagok és módszerek: Munkánk során *Klebsiella pneumoniae* (928-as (CIP8047) törzsszámú kórházi izolátum, Pasteur Intézet) K64 toktípust termelő változata ellen kerestünk litikus bakteriofágokat a Nemzeti Népegészségügyi Központ (NNK) szennyvízmintáiból. A ko-inkubáción alapuló fágpropagálási módszert követően a potenciális fágtörzseket tisztítottuk, majd morfológiailag jellemeztük transzmissziós elektronmikroszkóp (TEM) segítségével. A fág-DNS izolálását követően a genomot szekvenáltuk és analizáltuk.

Eredmények: Két, erősen litikus bakteriofág törzset vizsgáltunk alaposabban. A Kp_K64_3_2 határozott tok-depolimeráz aktivitást mutatott, míg a Kp_K64_4_2-nél ez a karakter nem volt megfigyelhető. A két fág között morfológiai