

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 követhetőek 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

és genetikai különbségek is kimutathatók voltak.

Következtetések: Mivel előzetes eredményeink alapján az általunk izolált két bakteriofág *in vitro* hatékonyan képes lizálni a K64-es tokkal rendelkező *K. pneumoniae* célbaktériumot, ezért potenciális ágenskét szolgálhatnak az ezen toktípussal rendelkező MDR *K. pneumoniae* által okozott kolonizáció esetén.

Páli Emese Kincső (Szegedi Tudományegyetem)

Duálisan targetált háromkarú polipeptid nanopartikulumok tesztelése a vér-agy gát sejttenyészetes modelljén

A központi idegrendszeri betegségek terápiáját megnehezíti, hogy a hatóanyagok nem képesek megfelelő mértékben a vérből az agy szövetébe jutni. Ennek legfőbb oka a vér-agy gát. Ígéretes módszer lehet a bejuttatásra a nanopartikulumok (NP) alkalmazása, és specifikus célzó ligandokkal való funkcionálizálása. A kutatócsoportunk által korábban előállított, az agyi endotélsejtek tápanyagszállító fehérjéit célzó ligandokkal jelölt nanopartikulumok hatékonyan bizonyultak sejttenyészetes modellen és állatmodellen egyaránt.

Megvizsgáltuk a glutation és az alanin ligand kombinációval célzott háromkarú polipeptid NP-k sejtfelvételét és permeabilitását, *in vitro* vér-agy gát modellen, valamint az átjutott nanohordozók bejutását, az egészséges kontrollból és a Parkinson-kóros betegekben származó közepagyi organoidokba. A célzott nanohordozók sejtfelvétele időfüggő volt, és már négy óra elteltével szignifikánsan jobb bejutást mutatott. A permeabilitási vizsgálatokban a ligandok jelenléte elősegítette az NP-k nagyobb mértékű penetrációját a vér-agy gáton és bejutását az organoidokba.

Eredményeink alapján megállapíthatjuk, hogy az glutation-alanin ligandkombinációval a polipeptid nanohordozók hatékonyabban jutottak át a vér-agy gáton és internalizálódtak agyi organoidokba. Ezen megfigyeléseink a jövőben hozzájárulhatnak a központi idegrendszert célzó, hatékonyabb gyógyszerbeviteli rendszerek kifejlesztéséhez.

Pék Ramóna (SZTE Móra Ferenc Szakkollégium)

A BigH1 foszforilációjának szerepe *Drosophila melanogaster*ben

A funkcionális kromatin szerveződésében a core hisztonok mellett a linker hiszton is alapvető fontosságú. A legtöbb szövetes állatban többféle linker hiszton variáns is jelen van, melyek expressziója egy bizonyos életszakaszra, szövetre vagy szervre korlátozódhat. Ecetmuslincában a genom csak kétféle linker hiszton kódol: a testi sejtekben kifejeződő H1-et, valamint az ivarvonalba és a korai embrióban megtalálható BigH1-et. Korábbi kísérletek során a BigH1 fehérjén