

XQI konferencia

ELTE Kémiai Intézet

Témabemutató hallgatóknak

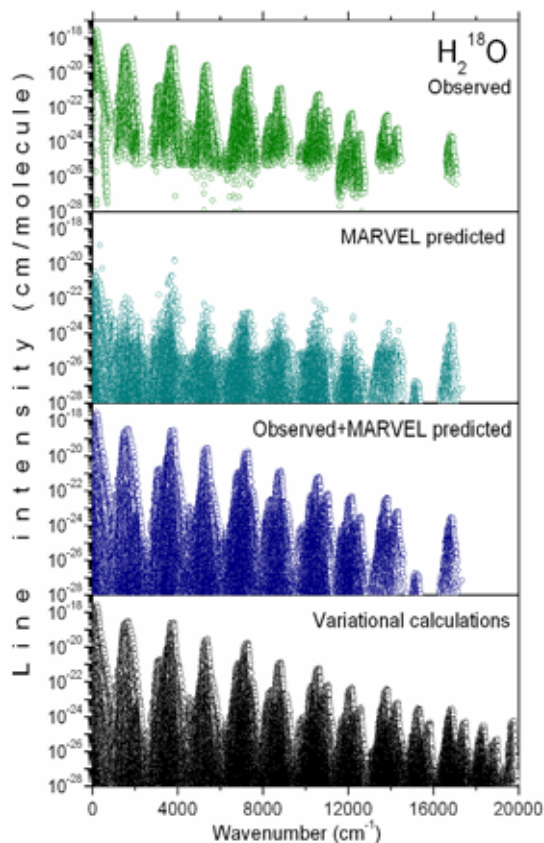
2009. február 6. péntek, 9:00–13:05

Eötvös terem, 083

9:00–9:05 Megnyitó

Császár Attila, Molekulaspektroszkópai Laboratórium (csaszar@chem.elte.hu):

Spectropedia



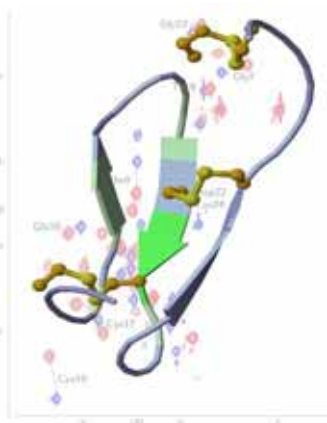
Bár a kémia hagyományosan kísérleti jellegű tudomány, a kvantumkémia és a számítógépek fejlődése lehetővé tesz olyan gyakorlatorientált kutatásokat, melyek a kísérleti és elméleti információ célszerű kombinálásával érnek el áttörő új eredményeket. Az egyik, gyakorlati szempontból is fontos terület, ahol a elmélet és kísérlet összekapcsolása a legtöbb hasznot ígéri, a nagyfelbontású molekulaspektroszkópia. Az adatbázis alapú molekulaspektroszkópia egy lehetséges megvalósulási módja a *Spectropedia*, mely egy web-es felületet és számtalan mögöttes programot (pl. MARVEL) jelent.

Céljaink között szerepel:

- A *Spectropedia* felhasználóbarát web-es felületének elkészítése, a kapcsolódó programok fejlesztése, a mögöttes nagyméretű adatbázis kiépítése, hatékony kezelése.
- A kvantumkémia eszköztárán alapuló variációs magmozgás számító módszerek ki- és továbbfejlesztése és ezen az alapon rezgési-forgási színképek, valamint reakciósebességi állandók nagy pontosságú számítása kisebb rendszerekre, részben nemzetközi együttműködésben.

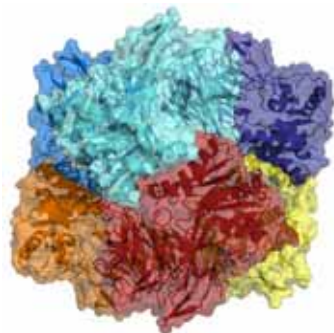
9:15–9:25 **Perczel András**, Szerkezeti Kémiai és Biológiai Laboratórium (perczel@chem.elte.hu):

A fehérjeműködés szerkezeti és dinamikai vonatkozásai



9:25–9:35 **Harmat Veronika**, MTA-ELTE Fehérjemodellező Kutatócsoport
(veronika@chem.elte.hu):

Fehérjék szerkezet-funkció összefüggéseinek felderítése



A fehérjék térszerkezetének meghatározása a fehérjeműködés atomi szintű megértését, és ezen keresztül a biológiai folyamatok kémiájának felderítését szolgálja. A fehérje-ligandum és fehérje-fehérje kölcsönhatások, valamint mutációk hatásainak vizsgálata olyan komplex kérdések megértésében segít, mint a fehérjék szabályozása, a megfelelő ligandum kiválasztása, gyógyszer hatóanyagok tervezése és gyógyszer-rezisztencia kialakulása. Az általunk vizsgált fehérjék olyan betegségek kialakulásában játszanak szerepet, mint az Alzheimer-kór, a rák különböző fajtái és krónikus gyulladásos folyamatok.

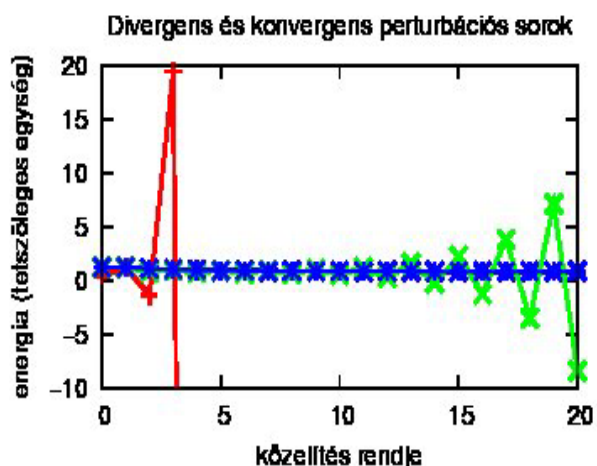
Jelenlegi témáink között szerepel:

- Az immunválasz szabályozása fehérje-fehérje kölcsönhatások segítségével.
- Nagy méretű, moduláris enzimek működése és szerveződése.
- A sejten belüli transzportfolyamatokban résztvevő "cargo" molekulák vizsgálata.

Kutatócsoportunkban lehetőség nyílik a röntgendiffrakciós és NMR-spektroszkópiai szerkezetfelderítés mellett a fehérjeelállítás és tisztítás, mutációtervezés módszereinek, elsajátítására is.

9:35–9:45 **Szabados Ágnes**, ELTE Elméleti Kémiai Laboratórium
(szabados@chem.elte.hu):

Egyszerű problémák a kvantumkémiaiában



Két egyszerű gondolat kerül bemutatásra, melyek tanulmányozhatók a „kémiai matematika” és az „elméleti kémia” kurzus anyagának ismeretében.

1) Foglalkozunk a molekulák stacionárius állapotait megadó Schrödinger-egyenlet – ami szempontunkból egy sajátérték egyenlet – közelítő megoldásával. A közelítés jósága jellemezhető az egzakt sajátértékre számítható alsó és felső korlát eltéréseivel. Célunk a közelítés javítása a két korlát eltéréseinek minimalizálása alapján.

2) Szén nanoszerkezetekben (pl. fullerének, nanocsövek) található C-C kötések hossza

kiválóan leírható egy félempirikus elméleti modellel, melynek alapja a Coulson-tól származó összefüggés a kötéshossz és a kötésrend között. A geometria megállapításához a kötéshosszak mellett szükség van a kötésszögek és a diéderes szögek ismeretére is. A feladat első lépése a kötésszög beépítése az elméleti modellbe. Ehhez – ismert geometriájú molekulákat vizsgálva – a kötésszög és elektronszerkezeti paraméterek (pl. sűrűségmátrix) között keresünk a Coulson-relációhoz hasonló összefüggést.

9:45–9:55 **Tarczay György**, Molekulaspektroszkópai Laboratórium
(tarczay@chem.elte.hu):

Mátrixizolációs spektroszkópai vizsgálatok

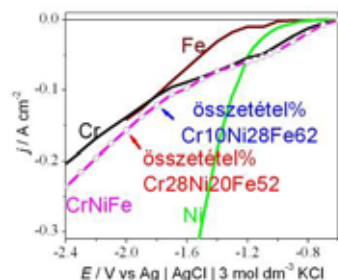


Laboratóriumunkban a közelmúltban egy mátrixizolációs berendezést építettünk. A mátrixizolációs technika lényege, hogy alacsony hőmérsékleten (esetünkben ~ 8 K), inert közegbe (többnyire Ar) fagyasztjuk a vizsgálandó specieszeket, majd spektroszkópiásan (IR, Raman, VCD, UV) jellemezzük ezeket. Az alacsony hőmérsékletnek, az inert közegnek, valamint a diffúziógátolt környezetnek köszönhetően jól felbontott, éles spektrumokat kaphatunk. Vizsgálhatjuk molekulák konformációs eloszlását, pirolízis és fotolízis segítségével reaktív specieszeket és gyököket, hőkezeléssel pedig gyenge másodlagos kötéssel összetartott molekulakomplexeket tanulmányozhatunk. Laboratóriumunkon belül a mátrixizolációs technikához alapvetően két alapvető kutatási irány kapcsolható: 1) bioorganikus molekulák és ezek komplexeinek vizsgálata mátrixizolációs IR és VCD technikákkal; 2) légkörkémiában és a csillagközi térben potenciálisan előforduló gyökök és molekulák előállítására mátrixban és ezek spektroszkópiás jellemzése. A kutatási témák elsősorban azok részére ajánlhatók, akik érdeklődnek a műszeres vizsgálatok iránt. Ugyanakkor azok is aktívan részt vehetnek a munkában, akik elsősorban a spektrumok elméleti (kvantumkémiai számítások) értelmezése iránt érdeklődnek.

9:55–10:05 Szünet

10:05–10:15 **Sziráki Laura**, ELTE Elektrokémiai és Elektroanalitikai Laboratórium
(sziraki@chem.elte.hu):

Elektrokémiai ötvözetleválasztás



A korszerű mikro-és nanotechnológiai alkalmazásokban a fémes szerkezetek elektrokémiai kialakítása és módosítása számos előnnyel bír a fizikai eljárásokhoz képest. A fémbevonatok leválási körülményeit az elektródpotenciállal, áramsűrűséggel pontosan, könnyen lehet szabályozni. Nagymértékű szelektivitás és számos nem-egyensúlyi szerkezet, összetétel is elérhető. A Fe, Ni, Co, Cr, Sn stb. fémek két- vagy háromalkotós ötvözetrétegei megfelelő komplexképző, oldószer és adalék jelenlétében amorf, vagy metastabil fázisokat tartalmaznak, amelyek mágneses, korróziós, elektrokatalitikus tulajdonságai kedvezőbbek a más úton előállított anyagokénál. A tudományos diákköri vagy szakdolgozati munka célja, hogy az újdonságnak számító Sn-Fe-Ni ötvözet galvanbevonat előállítására javasolt környezetbarát galvanfürdő működési paramétereit dolgozza ki és a fémek együttleválásának természetét jellemezze polarizációs görbék felvételével, illetve a tényleges leválási összetételt tükröző parciális polarizációs görbék analitikai meghatározásával. Lehetőség van az optimális bevonatok elektrokémiai tulajdonságainak vizsgálatára is.

10:15–10:25 **Csörgeiné Kurin Krisztina**, Nemlineáris Kémiai Dinamika Laboratórium (kurin@ludens.elte.hu):

Időben és térben periodikus kémiai reakciók (Témák a nemlineáris dinamikai jelenségek köréből)



Kutatási témák:

- Új, időben periodikus (oszilláló) kémiai reakciók előállítása homogén és heterogén rendszerekben;
 - Oszilláló kémiai reakciók mechanizmusának megismerése, az oszcillációs viselkedés szimulációja;
- Térben periodikus kémiai rendszerek: (kémiai hullámok és stacionárius szerkezetek) létrehozása, detektálása, a fizikai-kémiai háttér tanulmányozása.

Kutatás motivációja:

A kémiai periodicitás és kapcsolt jelenségeinek molekuláris szintű tanulmányozása, az itt feltárt összefüggések, törvényszerűségek segítségével szolgálhatnak az élő és élettelen természetben (biológia, társadalom, geológia, technológia,...) sokkal bonyolultabb formában megnyilvánuló, de lényegében hasonló jelenségek megértésében, azok formálásában.

10:25–10:35 **Szalay Péter**, Elméleti Kémiai Laboratórium (szalay@chem.elte.hu):

Kemi- és biolumineszcenciás folyamatok elektronszerkezeti problémáinak tanulmányozása magas szintű kvantumkémiai módszerekkel



A kémiai reakciók eredményeként fellépő fénykibocsátás (kemilumineszcencia) a természet egyik legizgalmasabb tüneménye. A jelenséget régóta és sokan vizsgálják és mára a fénytüneményt okozó folyamatokat nagyjából értjük: kémiai reakció során egy molekula gerjesztett állapota képződik, amely fény kibocsátásával stabilizálódik, kerül vissza alapállapotába; a fény színe a gerjesztett és az alapállapot energiakülönbségétől függ. A részletekben azonban még sok a

kérdőjel. Újonnan induló projekt keretében azokat a kérdéseket kívánom vizsgálni, melyeket eddig – az alkalmazott közelítő módszerek korlátai miatt – nem sikerült kielégítően megválaszolni, viszont a rendelkezésemre álló, az elmúlt évek kutatómunkája eredményeképpen kifejlesztett magas szintű elméleti módszerek alkalmasnak tűnnek a pontosabb megközelítéshez. Vizsgálni kívánom egyrészt a kemilumineszcenciás folyamatok mechanizmusát, (dioxetán, dioxetanon, dioxirán és származékai bomlását), a képződő (és a lumineszcenciáért felelős) oxigén gerjesztett állapotai megszűnésének dinamikáját. Végül a kapott eredmények ismeretében biolumineszcenciát mutató biológiai rendszerek vizsgálatát végezném el egy alkalmas luciferáz/luciferin rendszeren a magas szintű módszereket QM/MM technikával beillesztve.

10:35–10:45 **Szamos Jenő**, Központi Élelmiszertudományi Kutatóintézet
(j.szamos@cfri.hu):

Bioaktív élelmiszerfehérjék

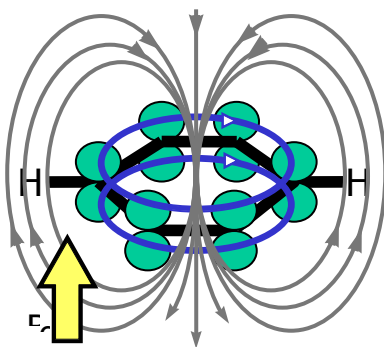


Az élelmiszerek bioaktív komponensei között fehérjék is előfordulnak, amelyek a táplálkozásban betöltött szerepükön kívül többek között specifikus, egészségjavító tulajdonságokkal is rendelkeznek. Az utóbbi években egyre inkább elismerik az élelmiszer nyersanyagokban előforduló bioaktív fehérjék jelentőségét. A bioaktív komponensek legfontosabb forrása a tej, de a növényi nyersanyagok is jelentős forrásként tekinthetők, közülük legismertebb a szója. A szójabab gazdag különböző bioaktív komponensekben, amelyek között három tumorgátló hatású fehérje is található.

A bioaktív fehérje tulajdonságainak tanulmányozása gyakran igényli annak tiszta formában való előállítását. A molekuláris biológia eszköztára ma már lehetővé teszi a rekombináns fehérjék rutinszerű előállítását, azonban gyakran szükség van a bioaktív fehérje természetes forrásból való kinyerésére. Egy fehérje tisztítása gyakorlatilag minden esetben elválasztástechnikai módszerek együttes alkalmazását igényli. A hagyományos fehérjetisztítás során kicsapásos módszereket, folyadékfázisok közötti megoszlást, folyadékromatográfiát (LPLC és FPLC) és elektroforetikus módszereket alkalmaznak erre a célra. A fehérje elválasztástechnika módszereinek alkalmazását néhány bioaktív élelmiszerfehérje példáján mutatjuk be.

10:45–10:55 **Magyarfalvi Gábor**, Mágnesesség molekuláris szinten
Molekulaspektroszkópai Laboratórium (gmagyarf@chem.elte.hu):

Mágnesesség molekuláris szinten



A molekulák elektronfelhőjének mágneses tulajdonságait, például az elektronok által keltett áramsűrűséget nem túl alaposan ismerik a kémikusok. Pedig ez a jelenség a kémiai rendszerek fontos jellemzőire vet fényt. A szerkezetvizsgálatban legfontosabb spektroszkópai módszer, az NMR közvetve ezt figyeli meg, de fontos szerepe lehet az áramsűrűségnek a kémiai viselkedés, pl. az aromaticitás megértésében. A témához kötődő kutatásokba bekapcsolódó diákok kész programokkal kémiai problémákra számításokat végezhetnek, programozhatnak, gondolkodhatnak, szemlé-

letes megjelenítéseken (3D grafika) dolgozhatnak, de műszeres (spektroszkópai) méréseket is végezhetnek a téma kapcsán.

10:55–11:05 Szünet

11:05–11:15 **Inzelt György – Kriston Ákos**, ELTE Kémiai Intézet Elektroanalitikai és elektrokémiai laboratórium (inzeltgy@chem.elte.hu):

Tüzelőanyag-cellák a jövő energiaellátásában



A tüzelőanyag-elemek, olyan elektrokémiai energia átalakító eszközök, amelyek a kémiai energiát közvetlenül és nagy hatásfokkal tudják elektromos energiává alakítani. A szilárd polimerelektrolit membránt tartalmazó cellák lelke egy 0,1 cm-nél vékonyabb, hidratált protoncserélő membrán, amely csak H^+ - ionokat enged át. A membránt mindkét oldalán porózus

katalizátorral, általában platinával vonják be. A hidrogént és az oxigént (levegőt) a membrán két ellentétes oldalán vezetik a cellába. A hidrogénből keletkező H^+ - ionok áthaladva a membránon, annak másik oldalán az oxigénredukció termékével, az OH^- - ionokkal vízzé egyesülnek. Kutatócsoportunk a magas színvonalú elméleti elektrokémiai ismeretek felhasználva fejleszt a gyakorlatban is alkalmazható megoldásokat. Elektrokémiai kísérletek mellett matematikai szimulációs technikákat használunk, hogy mind mélyebben belelássunk és elemezni tudjuk a tüzelőanyag-cellákban lejároló folyamatokat abból a célból, hogy hatékony, megbízható áramforrásokat tudjunk előállítani. Az elméleti munka mellett hidrogén üzemű tüzelőanyag-cellás járműveket is fejlesztünk, amelyekkel különböző versenyeken indulunk.

Kutatásainkról, csoportunkról többet a www.fuelcell.hu honlapon lehet olvasni.

11:15–11:25 **Eke Zsuzsanna**, EKOL: Elválasztástechnikai Kutató és Oktató Laboratórium (eke.zsuzsanna@wirc.eu):

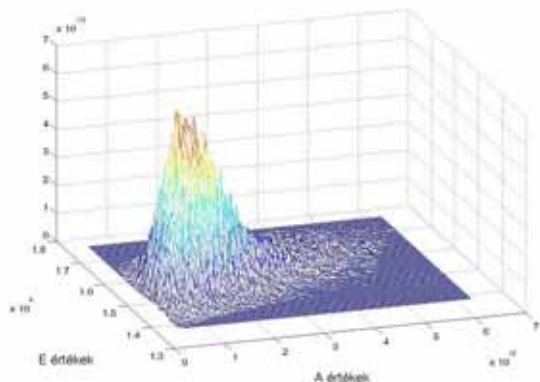


Az analitikai kémia egyik legszélesebb körben alkalmazott ága az elválasztástechnika, azon belül is a gáz- és a folyadékkromatográfia. A kromatográfias vizsgálatok egyaránt nélkülözhetetlenek a gyógyszeriparban, a kozmetikai iparban, a környezetvédelemben, a festékiparban a műanyagiparban, az élelmiszerek minőségellenőrzésében, a doppingvizsgálatokban ... Az EKOL-ban kutatási és oktatási munkát végző hallgatók a legmodernebb Agilent

készülékekkel (GC, GC-MS, HPLC, LC-MS) végzett munkájuk során sajátíthatják el a kromatográfia csínját-bínját. Ezzel olyan piacképes tudást és kapcsolatokat szerezve, mely igencsak megkönnyíti elhelyezkedésüket a végzést követően. Ha gyakorlatias gondolkodású, a tiszta munkát kedvelő, a készülékekhez vonzódó hallgató vagy, aki a mintaelőkészítéstől sem ózdkodik, akkor mi vagyunk a neked megfelelő laboratórium.

11:25–11:35 **Turányi Tamás**, Reakciókinetikai Laboratórium (www.turanyi.eu):

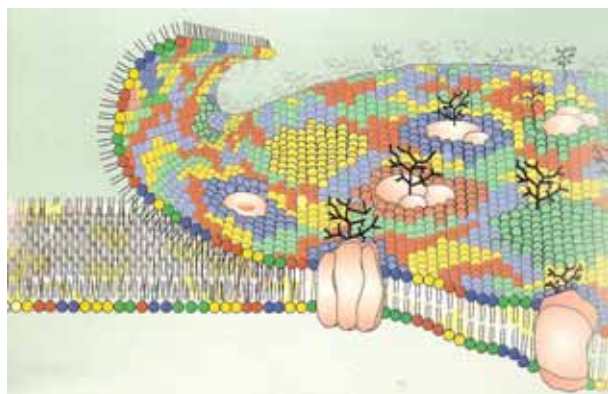
Megbízható reakciókinetikai modellek kifejlesztése



Egy gázkinetikai mérési adatsorból eddig általában egy vagy legfeljebb néhány reakciólépés kinetikai paramétereit határozták meg és az így kapott Arrhenius paraméterek bizonytalansága viszonylag nagy volt. Ha egy közös reakciómechanizmus alapján értékelnek ki több száz, különböző laboratóriumból származó mérési adatot, és ezekre egyszerre illesztik több reakciólépés Arrhenius paramétereit, akkor a kinetikai paraméterek meghatározásának pontossága jelentősen javítható. A megközelítés lényege, hogy nem az egyes paraméterek „legjobb” értékét próbáljuk meghatározni, hanem helyette a paraméterek közös valószínűségi sűrűségfüggvényét. Ilyen módon azonnal egy nagyon pontos leírását is megkapjuk a paraméterek bizonytalanságának. A cél egy ilyen módszert használó számítógépi program kidolgozása és annak alkalmazása a hidrogén égésének reakciólépéseire. A kidolgozott program egy teljesen új megközelítésű adatkiértékelési mód első és széles körben alkalmazott képviselője lehet. A munka kapcsolódik a PrIME kezdeményezéshez (www.primekinetics.org), amelynek célja nemzetközi együttműködésben gázkinetikai adatbázisok és szoftverek fejlesztése. Az ábra Arrhenius-paraméterek kétdimenziós együttes sűrűségfüggvényét ábrázolja a $H+H_2O_2=HO_2+H_2$ reakció esetén.

11:35–11:45 **Kiss Éva, Hill Katalin**, ELTE Határfelületi- és Nanoszerkezetek Laboratórium (kisseva@chem.elte.hu):

Fluid határfelületi filmek – biokompatibilitás – membránaffinitás



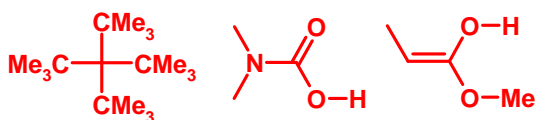
Az élő szervezettel érintkező idegen anyagokkal – implantátumokkal, kolloidális gyógyszerhordozókkal – szemben alapvető követelmény a biokompatibilitás, melyet döntően határfelületi tulajdonságok szabnak meg. A határfelületi kölcsönhatások kedvező befolyásolása jobb hatóanyag felszívódást, erősebb antibakteriális hatást, vagy pl. eredményesebb implantátum beültetést tesz lehetővé.

Kutatásunk a határfelületi molekuláris kölcsönhatások tanulmányozására, a határfelületek szerkezetvizsgálatára irányul azzal a céllal, hogy felületmódosítással, illetve a hatóanyag kémiai módosításával optimalizáljuk ezen kölcsönhatásokat. A vizsgálati módszerek között szerepel a Langmuir-technika, melynek segítségével egyszerűsített modellrendszereken – rendezett, fluid molekulafilmeken – kvantitativ tanulmányozhatóak olyan folyamatok, mint az idegen anyag felületén lejátszódó fehérjeadsorpció, gyógyszermolekulák sejtmembránba való behatolása, antibakteriális vegyületek lipidréteget roncsoló hatása. Emellett a felületeken bekövetkező kémiai és szerkezeti változásokat felületérzékeny analitikai, spektroszkópiai, morfológiai módszerekkel (AFM, ellipszometria, XPS, SFG) követjük nyomon.

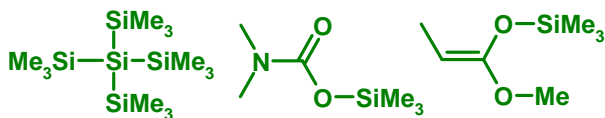
11:45–11:55 **Szalay Roland**, Szilíciumorganikus Kémiai Laboratórium (szalayr@chem.elte.hu):

Miért érdekes a szilíciumorganikus kémia?

A szilíciumorganikus vegyületek számos olyan tulajdonsággal rendelkeznek, melyeknek nincs párja a megfelelő szén-, ill. hidrogén-analóg vegyületek körében.



n e m l é t e z n e k !



s t a b i l m o l e k u l á k

„*Szilícium-völgyünkben*” az alábbi témákat hirdetjük meg:

- szililezett szén-sav-származékok előállítása, szerkezetvizsgálata kísérleti és elméleti módszerekkel, reakcióik tanulmányozása;
- kemo-/regio-/sztereoselektív, ill. katalitikus szililezési és deszililezési eljárások kidolgozása;
- szilárdfázisú, ill. extraktív szililezési technikák kifejlesztése;
- átmenetifém-komplexek előállítása szilícium-tartalmú prekursorokból kiindulva, és felhasználásuk homogén katalitikus folyamatokban;

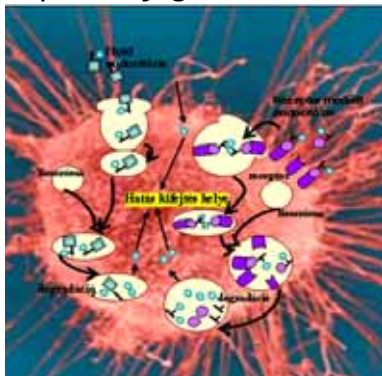
matokban;

- szilíciumvegyületek alkalmazása anyagtudományi célokra (pl. megosztófázisok, módosított nanocsövek, szerves mágnesek készítésére);
- ón(IV)-analóg vegyületek előállítása, szerkezetkutatása specifikus módszerekkel (^{119}Sn -NMR-, $^{119\text{m}}\text{Sn}$ -Mössbauer-spektroszkópia), szolvólízisük tanulmányozása;
- *N*-/*O*-szilil-, ill. -sztannil-amid származékok kapcsolási reakcióinak vizsgálata.

11:55–12:05 Szünet

12:05–12:15 **Mező Gábor**, ELTE-MTA Peptidkémiai Tanszéki Kutatócsoport (gmezo@elte.hu):

Peptidkonjugátumokkal az öregkor életminőségének javítása érdekében



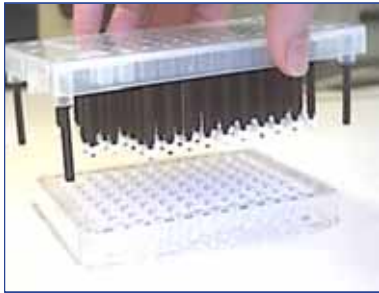
A feltételezések szerint az egyik kitörési pont a rák elleni küzdelemben az irányított tumorterápia lehet. Ez azon alapul, hogy a rákos sejteken megjelenő specifikus, vagy túltermelődött receptorokat vesszük célba megfelelő konjugátumokkal. Ezek a konjugátumok tartalmaznak irányító molekulát (pl. peptidhormont) és tumorelles hatású gyógyszer molekulát. A konjugátumok segítségével növelhető a gyógyszerek szelektivitása, és csökkenthetők toxikus mellékhatásaik. Célunk tehát többfunkciós, tumorelles hatású peptidok és peptid konjugátumok szintézise és vizsgálata.

A szervezetbe beültetett implantátumokkal kapcsolatos egyik probléma az, hogy azokat a szervezet nem fogadja be. Ezért olyan peptidkonjugátumokat tervezünk, amelyek alkalmasak az implantátumok felületének befedezésére, és ez által segítik azok felületén a sejtek letapadását a beültetés után. Kutatásokat végzünk az Alzheimer-kór korai diagnosztizálására alkalmas vegyületek előállítására, és olyan szintetikus vakcinák szintézisére teszünk kísérletet, amelyek alkalmasak lehetnek a kór gyógyítására.

Kutatócsoportunkban a peptidszintetikus módszerek elsajátítása mellett lehetőség van a korszerű analitikai módszerek elsajátítására (pl. HPLC, tömegspektrometria, aminosav analízis), valamint az előállított vegyületek *in vitro* funkcionális vizsgálatára.

12:15–12:25 **Magyar Anna**, ELTE-MTA Peptidkémiai Tanszéki Kutatócsoport (magyar@elte.hu):

Fehérje alapú módszer a rheumatoid arthritis korai kimutatására



A rheumatoid arthritis (RA) az egész szervezet betegsége, a föld népességének 1-2 %-t érinti.

- patogenezis - ismeretlen eredetű autoimmun betegség
- kiváltó ok - ismeretlen, a peptidil arginin deimináz (PADI) enzim hatására a szervezetben bizonyos fehérjék egyes argininjei citrullinná alakulnak át
- cél - a betegség korai stádiumában lévő betegek kiszűrése
- megoldás - egy rutindiagnosztikai módszer kifejlesztése

Munkánk során, irodalmi adatok alapján kiválasztott fehérjék (filaggrin, fibrin, vimentin) antigenitásáért felelős peptid szakaszait, ezek argininek helyett citrullint tartalmazó analógjait, N- és C-terminálisán rövidített, valamint biotint tartalmazó származékait állítjuk elő „MULTIPIN” (Chiron Technologies, Ausztrália) parallel szintézistechnika és szilárdfázisú peptidszintézis alkalmazásával. ELISA kísérletekben RA-es ill. egyéb autoimmun betegségben szenvedő betegek és egészséges véradók szérumában vizsgáljuk az autoantitestek jelenlétét.

12:25–12:35 **Bősze Szilvia**, ELTE-MTA Peptidkémiai Tanszéki Kutatócsoport (bosze@chem.elte.hu):

Peptidek és peptidkonjugátumok a *Mycobacterium tuberculosis* fertőzés korai diagnosztikájára és hatékonyabb célzott terápiájára



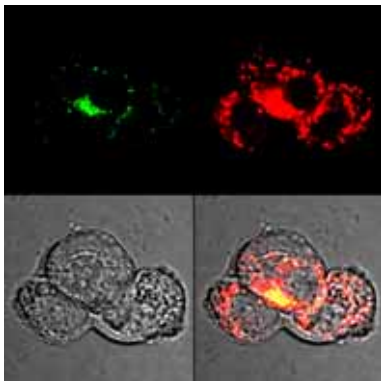
A tuberkulózis napjainkban is az egyik legjelentősebb népegészségügyi probléma világszerte. A megbetegedést okozó *Mycobacterium tuberculosis* lassan szaporodó intracelluláris baktérium. A betegség kezelésében alkalmazott vegyületek bejutása a fertőzött makrofágokba elsősorban diffúzió révén történhet, korlátozott mértékben. Peptidalapú hordozók alkalmazásával célunk az új és jelenleg terápiásan alkalmazott antituberkulotikumok sejt-, illetve szövet-specifikus szelektív célbajuttatása és

mellékhatásaik kiküszöbölése.

Kutatásaink során olyan biológiailag aktív, molekulárisan jól jellemzett peptidalapú konjugátumokat tervezünk és állítunk elő, amelyek alkalmasak a *Mycobacterium tuberculosis* fertőzöttség korai, gyors és specifikus kimutatására, valamint a kezelés hatékonyságának monitorozására. Kutatócsoportunkban a peptidszintetikus módszerek elsajátítása mellett lehetőség van a korszerű analitikai módszerek elsajátítására (pl. HPLC, tömegspektrometria, aminosav analízis), valamint az előállított vegyületek *in vitro* funkcionális vizsgálatára.

12:35–12:45 **Oláhné Szabó Rita, Orbán Erika**, ELTE-MTA Peptidkémiai Tanszéki Kutatócsoport (rszabo@elte.hu, eorban2@gmail.com):

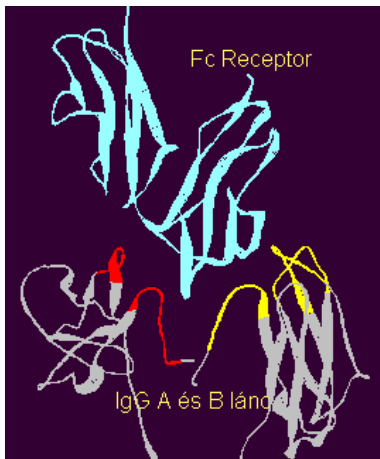
Daunomicin célbajuttatása tumorsejtekbe makromolekuláris hordozók segítségével



A daganatterápiában használt vegyületek többsége önmagában toxikus, sok mellékhatást okozó vegyület. A hatóanyag makromolekuláris, illetve peptid hordozóhoz kapcsolása csökkentheti annak mellékhatásait, módosíthatja szervezetbeni eloszlását, javíthatja oldékonyságát vizes közegben, valamint lehetőséget kínálhat a hatóanyag sejt-, illetve szövetspecifikus célbajuttatására is. A konjugátumokban alkalmazott kapcsolóstruktúrák elősegítik, hogy a hatóanyag az endoszómák savas környezetében vagy enzimatis hasítás által felszabaduljon a konjugátumból és kifejtsse hatását a sejtekben. Kutatásaink során daunomicint tartalmazó konjugátumokat juttatunk különböző eredetű tumorsejtekbe. A hallgatók megismerkedhetnek a peptidok és konjugátumok szintézisével, a tumorsejtek tenyésztésével és a konjugátumok hatásvizsgálata során alkalmazott *in vitro* biológiai módszerekkel. A tervezett kísérletek: (i) A hatóanyagok és konjugátumaik hatásának vizsgálata tumorsejtek életképességére MTT teszttel és áramlási citometriával. (ii) A hatóanyagok és konjugátumok sejtbe jutásának vizsgálata áramlási citometriával; (iii) A konjugátum sejten belüli sorsának követése konfokális mikroszkóppal; (iv) A sejtbe jutás mechanizmusának vizsgálata.

12:45–12:55 **Uray Katalin** ELTE-MTA Peptidkémiai Kutatócsoport (uray@chem.elte.hu):

IgG Fc peptidok és peptidkimérák szintézise autoimmun betegségek kezelése céljából



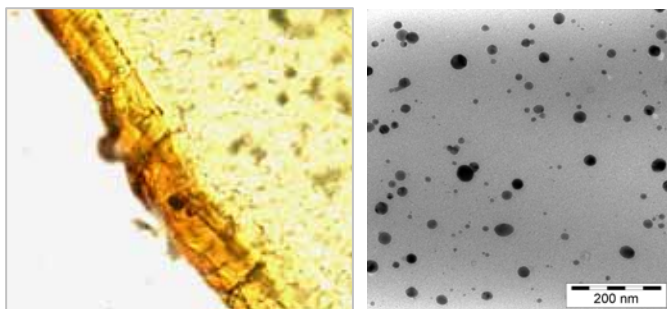
receptor kapcsolódást.

Az autoimmun betegségekre (rheumatoid arthritis, szisztémás lupus eritematózus, diabetes mellitus, stb) jellemző, hogy az immunrendszer a saját szövetek, szervek ellen fordul, ezek ellen úgynevezett autoantitesteket termel. Az autoantitestek a saját fehérjéhez való kötődés után az Fc gamma receptorokhoz való kötődés útján fejtik ki káros hatásukat; egy lehetőség ennek megakadályozására az autoantitestek specifikus gátlása. Ehhez meg kell ismerni az ellenanyag – Fc receptor kölcsönhatást.

Célunk az Fc receptorhoz hatékonyan kötődő peptidok szintézise. Olyan peptidkonstrukciókat tervezünk, amelyekben a fehérje szekvenciálisan távoli, de térben közeli szakaszait összekapcsoljuk, és ezáltal utánozzuk az antitest –

12:55–13:05 **Iván Béla**, Szerves Kémiai Tanszék és Polimer Kémiai és Anyagtudományi Osztály, MTA Kémiai Kutatóközpont, Anyag- és Környezetkémiai Intézet (bi@chemres.hu):

Különleges tulajdonságú új makromolekuláris anyagok mint a XXI. század ipari forradalmának alapanyagai: nanotechnológiáktól és a nanoméretű, katalizáló nemesfémektől az intelligens gyógyszerleadásig és a génszabászatig



Számítógépes chippek nem léteznének úgynevezett „fotoreziszt” polimerek nélkül, kontakt lencsék, eldobható pelenkák és intim betétek polimer hidrogélek nélkül, tintapatron festékek és környezetbarát tisztítószeres amfifil blokk-kopolimerek nélkül, higanymentes fogszínű fogtömőanyagok megfelelő tulajdonságú polimerek nélkül

stb. stb... Az új típusú, szerkezetű és tulajdonságú, egyúttal újabb és újabb felhasználási lehetőségeket kínáló polimerek kutatása – mint az előttünk álló század ipari forradalma egyik legfontosabb anyagcsaládja – iránt világszerte rendkívül nagy az érdeklődés. Ilyen irányokba mutató tudományos diákköri témákkal lehet foglalkozni egy fiatalokból álló sikeres csapatban: **(1)** új funkciós makromolekulák, **(2)** új hiperelágazásos polimerek, **(3)** új típusú csillag polimerek, **(4)** nanoszerkezetű „kaméleon” polimer kotérhálók, **(5)** szabályozott és késleltetett gyógyszerleadásra képes új típusú polimer mátrixok, **(6)** szintetikus polimer hordozók a génszabászatban (DNS és RNS poliplexek), **(7)** új makromolekuláris nanohibridek (nanokatalizátorok, protonvezető filmek üzemanyagcellákhoz, fényérzékeny nanohibridek napfényelemekhez, antibakteriális anyagok stb.), **(8)** intelligens polimerek, **(9)** polimerek analízise multidetektoros gélpermeációs kromatográfiával, **(10)** „zöld” polimer kémia, **(11)** polimerek és műanyagok környezetileg előnyös kémiai átalakításai és lebontása, **(12)** a kémia oktatásában alkalmazható új polimer kémiai demonstrációs kísérletek kidolgozása stb.