ELVÁLASZTÁSTUDOMÁNYI VÁNDORGYŰLÉS 2026

2026. november 4-6. | Sopron



Magyar Elválasztástudományi Társaság

ABSZTRAKTOK

ISBN 978-615-5270-87-1

a Magyar Elválasztástudományi Társaság konferenciája

SZÓBELI ELŐADÁSOK

E-01 | Szerves mikroszennyezők környezetanalitikai vizsgálata és eltávolításukat célzó vízkezelési technológiák hatásfokának ellenőrzése UHPLC-MS/MS technikával

Maász Gábor

Soós Ernő Kutató-Fejlesztő Központ, Pannon Egyetem, Nagykanizsa

A szerves mikroszennyezők környezetanalitikai vizsgálata egyre szélesebb komponenskört, egyre alacsonyabb kimutatási és mennyiségi meghatározási határokat, valamint mindezek mellett megbízható kvantifikációt követel meg. Az előadás ezt a három, egymással gyakran versengő célt a „mikroszennyező-analitika gyakorlati trilemmájaként" tárgyalja, és bemutatja, hogy a széles spektrumú UHPLC–MS/MS módszerek fejlesztése során milyen kompromisszumok szükségesek a jó minőségű adatszolgáltatáshoz.

A bemutatott megközelítés középpontjában a vízi környezetben előforduló szerves mikroszennyezők – többek között gyógyszermaradványok, peszticidek, hormonhatású vegyületek és egyéb prioritás szennyezők – célzott, multikomponensű meghatározása áll. A módszerfejlesztési igényeket az uniós prioritási listák, megfigyelési programok és az egyre szigorúbb kvantifikációs követelmények is erősítik. A monitoring feladatok ezért nemcsak nagy érzékenységet, hanem különböző fizikai-kémiai tulajdonságú analitok egyidejű, reprodukálható mérését is megkövetelik.

A megbízható kvantifikáció érdekében kiemelt szerepet kap a mintavétel és -előkészítés, a szilárd fázisú extrakció, a belső standardok alkalmazása, valamint a kromatográfiás és tömegspektrometriás paraméterek optimalizálása. A különböző polaritású és sav-bázis karakterű analitok egyidejű mérését az eluensösszetétel, az additívek, a pH, az oszlopkémia és az ionizációs viszonyok egyaránt befolyásolják; egyes erősen poláros vegyületek esetében alternatív elválasztási módok, például HILIC alkalmazása is szükségessé válhat. Konkrét példákon keresztül jelenik meg az eluensadditívek okozta jelerősítés vagy jelvesztés, az adduktképződés, a belső standardok eltérő korrekciós képessége, valamint az, hogy ugyanazon analitikai eljárás teljesítménye jelentősen változhat felszíni vízben, tisztított szennyvízben és membrántechnológiai mintákban.

Az előadás külön hangsúlyt helyez a mátrixhatásokra, amelyek jelelnyomást vagy jelerősödést okozva jelentősen módosíthatják a kvantitatív eredményeket. Bemutatásra kerül a minta dúsításának, a hígításnak, az injektált térfogatnak és a belső standard-választásnak a szerepe, valamint ezek kapcsolata a visszanyeréssel, a reprodukálhatósággal és a módszer pontosságával. A módszeralkalmasságot rendszeralkalmassági vizsgálatok, QC-minták, vakminták és nemzetközi körvizsgálati tapasztalatok egészítik ki, amelyek jól jelzik a laboratóriumi módszerek valós teljesítőképességét.

A fejlesztési és validálási szempontokat vízkezelési technológiai alkalmazások példái zárják, különös tekintettel a membránszűrésre. A permeátum, koncentrátum és betáp

eltérő mátrixai jól szemléltetik, hogy a technológiai hatásfok csak megfelelően korrigált analitikai eredmények alapján ítélhető meg. Az előadás fő üzenete, hogy a nagy érzékenység önmagában nem elegendő: a környezetanalitikai eredmény akkor válik valóban értékessé, ha a széles komponenskör mellett a kvantifikáció megbízhatósága is igazolható, és az analitikai módszer a vizsgált technológiai kérdéshez illeszkedik.

E-02 | Gyors Taylor diszperziós analízis a fehérjeadszorpció hatásainak minimalizálására

Szabó Ruben, Andrási Melinda, Gayatri Vishwakarma, **Gáspár Attila**

Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék, Debreceni Egyetem, Debrecen

Az elmúlt években kutatásaink középpontjában a Taylor-diszperzió analitikai célú alkalmazási lehetőségeinek vizsgálata áll. A jelenség azon alapul, hogy amikor egy kis térfogatú mintazónát lamináris áramlásba injektálunk, a komponensek a molekuláris diffúzió, valamint a parabolikus áramlási profil következtében szélesednek ki. Emiatt a kapilláris közepéhez közelebb elhelyezkedő komponensek gyorsabban haladnak, mint a kapilláris falához közeliek. A molekuláris diffúzió végül radiális irányban, vagyis a kapilláris keresztmetszetében kiegyenlíti a sebességkülönbségeket, és a kapilláris tengelye mentén szimmetrikus koncentrációeloszlás alakul ki. Ennek eredményeként Gauss-görbéhez hasonló, harang alakú csúcs figyelhető meg.

A Taylor diszperzió jelenség kihasználásával nemrégiben olyan elektroporlasztásos ionizációs tömegspektrometriás (TADA-MS) módszert dolgoztunk, mely lehetővé teszi nagymolekulák (pl. terápiás fehérjék) közvetlen mintainjektálásos ESI-MS meghatározását gyógyszerészeti termékekben a zavaró hatások jelentős mértékű csökkenése révén [1].

A Taylor diszperzió jelenségét elsősorban a Taylor diszperziós analízis (TDA) során használják ki, mely egy jól tanulmányozott módszer az oldatban lévő molekulák diffúziós együtthatójának (illetve hidrodinamikai sugarának) meghatározására [2]. A TDA-t kis belső átmérőjű kapillárisok alkalmazásával végzik. A fehérjék azonban erősen hajlamosak a kapilláris falához adszorbeálódni, ami torzítja a csúcsok alakját, rontja a reprodukálhatóságot és a mérési eredmények pontosságát [3]. Munkánk során egy egyszerű, ugyanakkor hatékony módszert javaslunk a fehérjék és a kapilláris fala közötti kölcsönhatások minimalizálására. Ha a TDA mérést gyorsan végezzük, a parabolikus áramlási profil elülső része elkerüli a kapilláris fallal való érintkezést, így a minta jelentős része a kapilláris középső tartományában marad. Ennek következtében a beinjektált mintazóna elülső részén található nagyméretű molekulák minimális mértékben adszorbeálódnak a kapilláris falán, vagy egyáltalán nem lép fel adszorpció [4]. Vizsgáltuk e gyors TDA-megközelítés elméleti hátterét és gyakorlati megvalósítását, amelyben a tartózkodási idő 1, sőt 0,1 percnél is rövidebb.

Ezt a munkát a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Hivatal (K142134)támogatta.

[1] Szabo R., Nagy C., Gaspar A., *Angew. Chem. Int. Ed*. 2024, 63, e202318225
[2] Bello, M. S.; Rezzonico, R.; Righetti, P. G. *Science* 1994, 266, 773−776
[3] Vishwakarma, G.; Andrási M.; Szabó R.; Szabó K.; Gáspár A., Langmuir 2026, 42, 17194−17203
[4] Szabo R., Gyemant Gy., Nagy C., Andrasi M., Gaspar A., *Anal. Chem*. 2024, 96, 11309−11317

E-03 | Bemutatkozik az Altium

Radvánszky Katalin

ALTIUM International D.o.o., Zagreb, Croatia

E-04 | Elválasztástechnika fémek nélkül

Jakab Péter

UNICAM Magyarország Kft., Budapest

Az analitikai elválasztástechnika folyamatos fejlődésével egyre nagyobb jelentőséget kap a mintákban jelen lévő komponensek megbízható, reprodukálható és nagy érzékenységű meghatározása. A korszerű analitikai módszerekkel szemben támasztott követelmények nemcsak a detektálási teljesítményre és a szelektivitásra terjednek ki, hanem a mérési eredmények reprodukálhatóságára, a mintaveszteség minimalizálására és a rendszer által okozott analitikai torzítások csökkentésére is. Különösen nagy kihívást jelenthet azon vegyületek vizsgálata, amelyek kölcsönhatásba léphetnek a hagyományos folyadékkromatográfiás rendszerek fémes felületeivel. Az ilyen kölcsönhatások adszorpcióhoz, csúcsalak-romláshoz, csökkent visszanyeréshez és a módszer reprodukálhatóságának romlásához vezethetnek.

A fémes felületekkel való nem kívánt kölcsönhatások mérséklése különösen fontos olyan analitok esetében, amelyek funkciós csoportjaik vagy kémiai tulajdonságaik révén hajlamosak komplexképzésre vagy felületi adszorpcióra. Ilyenek lehetnek például egyes foszforilált vegyületek, savas karakterű molekulák, biomolekulák és más, komplex mintamátrixokban előforduló komponensek. E vegyületek analízise során a megfelelő rendszerkialakítás kulcsfontosságú lehet a megbízható csúcsalak, a megfelelő visszanyerés és az alacsonyabb kimutatási határ elérésében. Az inert folyadékkromatográfiás rendszerek alkalmazása lehetőséget biztosít arra, hogy a folyadékárammal érintkező felületek megfelelő kialakításával csökkentsük a nem specifikus kölcsönhatásokat, és ezáltal javítsuk az analitikai módszerek teljesítményét.

A Thermo Scientific Vanquish Amplify folyadékkromatográfiás rendszer az inert rendszerkialakítás analitikai jelentőségének egyik példája. Az ilyen technológiai megoldások különösen azokban az alkalmazásokban lehetnek előnyösek, amelyekben a hagyományos konfigurációkban tapasztalható felületi kölcsönhatások korlátozzák a módszer teljesítményét. A csúcsalak, a visszanyerés és a mérési reprodukálhatóság javítása hozzájárulhat a megbízhatóbb kvantitatív meghatározáshoz és a módszerfejlesztés hatékonyságának növeléséhez.

E-05 | Utazás a szemcse középpontjába: tartózkodási idő és állófázis-kihasználtság a folyadékkromatográfiában

Horváth Krisztián[1], Somfai Attila[2]

[1] *Pannon Egyetem, Természettudományi Központ, Veszprém*
[2] *Simkon, Budapest*

A porózus kromatográfiás szemcsékben végbemenő diffúzió jelentősen hozzájárul a sávszélesedéshez. A jellemző diffúziós időt gyakran a szemcsesugár négyzetével arányosnak tekintjük. A felszín felől belépő molekulák többsége azonban csak kis mélységig jut, és gyorsan visszatér a mozgófázisba. Jelen munka célja annak vizsgálata, hogy a belépést követő tartózkodási idő eloszlása és annak különböző jellemzői hogyan függnek a szemcsemérettől. Munkánk során gömb alakú szemcsékben háromdimenziós véletlen bolyongást szimuláltunk. A számítások öt szemcsesugarat (0,5–2,5 μm) és három lépéshosszt (0,01–1 nm) fedtek le. A sikeresen belépő molekulák tartózkodási idejének mediánja a belépést feloldó lépéshossz négyzetével arányos, és gyakorlatilag független a szemcsesugártól. Az átlag ezzel szemben a szemcsesugár és a lépéshossz szorzatával arányosan nő. Ennek oka, hogy kevés molekula jut a szemcse belsejébe, de ezek hosszú tartózkodása jelentősen befolyásolja az átlagot. A köztes időtartományban a valószínűségi sűrűség az idő −3/2 hatványa szerint csökken, a leghosszabb időknél pedig a véges szemcseméret miatt exponenciális lecsengés jelenik meg. A tartózkodási idő eloszlása ezért csak részben írható le Lévy–Smirnov-eloszlással.

E-06 | Gyors folyadékkromatográfia és retenciómodellezés a gyógyszeranalitikai gyakorlatban

Kormány Róbert

Egis Gyógyszergyár Zrt., Budapest

A korszerű gyógyszeranalitikai módszerfejlesztés hatékonysága és megbízhatósága akkor növelhető jelentősen, ha az Analytical Quality by Design (AQbD) szemléletet, az ultra-nagy hatékonyságú folyadékkromatográfiát (UHPLC) és a retenciómodellezést egységes rendszerként alkalmazzuk. A gyógyszerhatóanyagok és szennyezőik elválasztása rendkívül összetett feladat, mivel a komponensek szerkezete, polaritása és retenciós viselkedése jelentősen eltérhet. A hagyományos, empirikus módszerfejlesztés nagy számú kísérletet, jelentős idő- és oldószerfelhasználást igényel, miközben korlátozott információt ad a rendszer működéséről. Az AQbD ezzel szemben tudományos és kockázatalapú megközelítést kínál, amely az analitikai célprofil (ATP), a kritikus minőségi jellemzők, a kritikus módszerparaméterek és a tervezési tér (Design Space, DS) meghatározásán keresztül biztosítja a robusztus, életciklus alapú módszerfejlesztést. Ebben a környezetben a retenciómodellezés kulcsszerepet játszik, mert matematikai összefüggések segítségével képes előre jelezni a retenciós időket, a szelektivitást és a kritikus csúcspárok felbontását különböző kromatográfiás feltételek mellett.

A lineáris oldószererősségi modell, a hőmérsékletfüggő modellek és a modern szoftveres megközelítések lehetővé teszik, hogy néhány célzott kísérletből olyan prediktív modellek épüljenek fel, amelyekkel virtuálisan optimalizálható a módszer és meghatározható a működési tartomány. Az UHPLC technológia a rövid oszlopok és a kis szemcseméretű töltetek hatékony működtetésével, a csökkentett elemzési idő révén, biztosítja a gyors adatgyűjtést.

A három elem együttes alkalmazása közvetlen üzleti és tudományos előnyt jelent a gyógyszeripar számára. Csökkenti a fejlesztési időt, az oldószer- és mintafelhasználást, javítja a módszerek robusztusságát és reprodukálhatóságát, támogatja a kolonnafelcserélhetőséget és a módszertranszfert, valamint megkönnyíti a hatósági elvárásoknak megfelelő dokumentálást.

A kísérleti eredmények azt mutatják, hogy a retenciómodellezéssel támogatott AQbD-alapú UHPLC módszerfejlesztés nem egyszerűen gyorsabb, hanem magasabb szintű folyamatmegértést biztosít. Ez lehetővé teszi, hogy a kritikus elválasztási paraméterek hatása már a tervezési fázisban számszerűsíthető legyen, így a gyógyszeripari analitika a kísérletezésen alapuló megközelítésből egy prediktív, szimulációval támogatott és tudásalapú módszertani keretrendszer felé mozduljon el.

E-07 | A lineáris oldószererősségi modell alkalmazása porózus grafitos szén állófázisokon
Utilizing the Linear Solvent Strength (LSS) Model on Porous Graphitic Carbon Stationary Phases

Soós Barnabás[1,2], Kormány Róbert[1], Horváth Krisztián[2]

[1] *Drug Substance Analytical Development Division, Egis Pharmaceuticals PLC, Budapest*
[2] *Department of Analytical Chemistry, University of Pannonia, Veszprém*

Porous graphitic carbon (PGC) stationary phases offer unique advantages in high-performance liquid chromatography (HPLC), including exceptional thermal and pH stability, as well as distinctive selectivity profiles. These characteristics make PGC a promising alternative for separating mixtures containing both polar and non-polar compounds, such as allopurinol and its European Pharmacopoeia (Ph. Eur.) impurities. However, the atypical retention behavior of PGC phases raises questions about the applicability of conventional retention models, such as the linear solvent strength (LSS) model.

This study investigates the retention mechanism of allopurinol and its five Ph. Eur. impurities (ImpA–E) on a PGC stationary phase. A comprehensive experimental design was implemented, involving variation of column temperature (30–90 °C), mobile phase pH (2.0–3.0), and gradient time (5–20 min). Retention data were modeled using the LSS approach, and retention parameters were fitted with a custom Python script. The results demonstrated that LSS modeling yields high accuracy on PGC phases, with predicted retention times deviating less than ±3% from measured values.

Further method development was carried out using DryLab® 4 software, leveraging a three-dimensional design space (gradient time, temperature, pH) to optimize separation. An optimal working point was identified at pH 2.0, 60 °C, and a 6-minute linear gradient. Experimental validation confirmed the excellent agreement between predicted and observed chromatograms for all six components.

This work provides strong evidence that LSS-based retention modeling is applicable to PGC chromatography despite its non-conventional retention mechanisms. The developed method is fast, robust, and capable of resolving allopurinol and its impurities in a single run. The approach offers a generalizable framework for the systematic development of HPLC methods using PGC phases and expands the scope of modeling tools beyond traditional reversed-phase systems.

E-08 | Módszertranszferrel és robusztussággal kapcsolatos kihívások áthidalása tervezési tér (Design Space) modellezés segítségével

Zöldhegyi Arnold[1,2], Horváth Krisztián[2], Molnár Imre[1], Kormány Róbert[3]

[1] *Molnár-Institute for Applied Chromatography, Berlin, Berlin, Németország*
[2] *Pannon Egyetem, Veszprém, Veszprém*
[3] *Egis Gyógyszergyár, Budapest*

A nagyhatékonyságú folyadékkromatográfiában (HPLC) a robusztus és könnyen transzferálható analitikai módszerek elengedhetetlenek a konzisztens teljesítmény fenntartásához az analitikai eljárás teljes életciklusa során, beleértve akár az előre nem látható jövőbeli alkalmazási lehetőségeket is. Ennek ellenére az ipari gyakorlatban gyakran számolnak be robusztussággal kapcsolatos problémákról, különösen a laboratóriumon belüli vagy laboratóriumok közötti módszertranszfer során. Ezek a kihívások gyakran a módszer hiányos ismeretéből, valamint a HPLC-rendszerrel összefüggő hatások elégtelen figyelembevételéből fakadnak – ilyenek például a gradiens késési térfogat, az oszlopon kívüli zónaszélesedést okozó hatások, továbbá az eluens-adagolásban, a keveredési viselkedésben és az oszloptermosztálásban mutatkozó egyéb, elsőre kevésbé nyilvánvaló készülékek közötti eltérések.

Ebben a tekintetben a szisztematikus minőségtervezési elvek (AQbD) mentén felépített modellezési megközelítések értékes támogatást nyújthatnak mind a proaktív módszerfejlesztés, mind pedig az utólagos hibaelhárítás (*troubleshooting*) terén. Jelen munkánkban a DryLab tervezési tereit (*Design Spaces*) alkalmaztuk a különböző készülékek digitalizált modellezési ujjlenyomatainak létrehozására, ami kiterjedt *in silico* vizsgálatokat tett lehetővé, beleértve a módszer transzferálhatóságának mélyreható felmérését, valamint a finom, készülékfüggő robusztussági jellemzők értékelését.

E-09 | 70 éves a kedvenc egyenletünk

Felinger Attila

Analitikai és Környezeti Kémia Tanszék, Pécsi Tudományegyetem, Pécs

Hetven évvel ezelőtt, 1956-ban jelent meg az a közlemény, amely a kromatográfia egyik legismertebb és máig meghatározó összefüggését adta a kezünkbe. A van Deemter-egyenlet azóta is a kromatográfia egyik alapköve.

A Van Deemter-egyenlet egyszerű formában fogalmazza meg azt az alapvető összefüggést, hogy a kromatográfiás hatékonyság – az elméleti tányérmagasság – hogyan függ a mozgófázis lineáris sebességétől. A három tag különböző sávszélesedési mechanizmust kapcsol össze: az „örvénydiffúziót", a longitudinális diffúziót és a tömegátadás kinetikájából származó hozzájárulást.

A van Deemter-egyenlet jelentősége túlmutat magán a képleten. A kromatográfia fejlődésével a benne szereplő tényezők értelmezése és a sávszélesedés mechanizmusainak leírása is folyamatosan fejlődött. A modern töltetek, a kisebb szemcseméretek, az ultranagy nyomású folyadékkromatográfia és az új állófázisok világában már jóval összetettebb modellekkel dolgozunk. Az alapgondolat azonban változatlan maradt: megérteni, mi határozza meg a kromatográfiás hatékonyságot, és hogyan tudjuk azt javítani.

Kevés egyenlet mondhatja el magáról, hogy hét évtizeden keresztül generációk számára jelentette a kromatográfia egyik első elméleti kapaszkodóját. A van Deemter-egyenlet ilyen összefüggés. Nem csupán egy történeti képlet, hanem a kromatográfiás gondolkodás egyik maradandó példája arra, hogyan lehet egy bonyolult fizikai folyamatot egy egyszerű, jól értelmezhető összefüggésben megragadni.

Hetven év után is ugyanazt az alapvető kérdést tesszük fel: hogyan lehet gyorsabban, hatékonyabban és jobb felbontással elválasztani? A válasz keresése pedig ma is ugyanahhoz a görbéhez vezet vissza.

E-10 | Folyadékkromatográfiás csatolások bioaktív növényi komponensek vizsgálatára

Móricz M. Ágnes[1], Baglyas Márton[1,2], Cselőtey Anna[1], Bozsó Zoltán[1]

[1] *HUN-REN Agrártudományi Kutatóközpont Növényvédelmi Intézet, Növényi Kórélettani Osztály, Budapest*
[2] *Semmelweis Egyetem Doktori Iskola, Budapest*

A természetben több mint 300 ezer növény található, amelyek a kedvezőtlen körülmények közötti túléléshez bioaktív vegyületeket (másodlagos metabolitokat) állítanak elő. Ezen bioaktív vegyületek közé tartoznak pl. a terpének, fenolos vegyületek, alkaloidok, amik antioxidáns, antibakteriális és gombaellenes tulajdonságokkal rendelkeznek, így segítik a növényeket a különféle biotikus és abiotikus stressz hatások elleni védekezésben. A növényi bioaktív vegyületeket már régóta alkalmazzák a hagyományos gyógyászatban, amely célja az immunrendszer erősítése, a különféle betegségek megelőzése és az azok elleni küzdelem támogatása.

A növények országa kimeríthetetlen forrást biztosít új bioaktív komponensek felfedezésére, de ezek idő- és költséghatékony felkutatása megfelelő kutatási stratégiát igényel. Az előadásban különféle csatolt technikák és módszerek alkalmazását mutatom be, többek között vékonyrétegkromatográfiához (TLC) csatolt bioaktivitás tesztek, TLC–HRMS/MS, 2D-TLC–*Bacillus subtilis*–HRMS/MS, DPPH-HPLC–UV és HPLC–HRMS/MS alkalmazását, amelyek új bioaktív (antioxidáns, antibakteriális és antifungális) természetes vegyületek megismeréséhez vezettek.

A munka az NKFIH OTKA SNN139496 pályázat támogatásával készült.

E-11 | Retek mikrozöld bioaktív komponenseinek változása abiotikus stressz hatására

B. Tóth Szabolcs[1], Róde Lea[1,2]

[1] *Eszterházy Károly Katolikus Egyetem, Biológia Intézet, Növényélettani Tanszék, Eger*
[2] *Magyar Agrár és Élettudományi Egyetem, Természettudományok Doktori Iskola, Gödöllő*

A retek mikrozöld (Raphanus sativus) egy rendkívül gyorsan fejlődő, csípős, jellegzetes és karakteres ízű szuperélelmiszernek számít napjainkban, amely a kifejlett retekhez képest sokszoros koncentrációban tartalmaz vitaminokat és ásványi anyagokat. Legfőbb bioaktív vegyületei a glükozinolátok és az belőlük képződő szulforafán, amelyek bizonyítottan erős daganatellenes, gyulladáscsökkentő és májvédő hatással bírnak. Kiemelkedően magas C-vitamin-, béta-karotin- és színanyagtartalma (antocianinjai) révén hatékonyan támogatja az immunrendszert és semlegesíti a szervezetben a káros szabad gyököket. Nagyszerű forrása a létfontosságú mikroelemeknek, különösen a vasnak, kalciumnak, magnéziumnak és káliumnak, amelyek hozzájárulnak a szív- és érrendszer egészségéhez. Gyors, mindössze 6-10 napos termesztési ideje miatt nagyon alkalmas az otthoni, ablakban nevelt kiskertekbe.

A vizsgálat során retek mikrozöldet abiotikus stresszhatásnak tettünk ki. A stresszhatás indukálta bioaktív komponensösszetétel változását származékképzés (BSTFA+TMCS) után GCMS technikával vizsgáltuk, kiemelten a szulforafán tartalomra is. A kapott eredmények szignifikáns különbséget mutatnak az abiotikus tényező bioaktív komponensekre gyakorolt hatásában. A GCMS vizsgálatok által meghatározott eredmények kiegészítéseként antioxidáns kapacitás mérést is végeztünk különböző módszerekkel. A kromatográfiás vizsgálatok eredményeit az antioxidáns kapacitás mérési eredményei alátámasztották illetve kiegészítették.

E-12 | Bioaktív, antimikrobiális másodlagos anyagcseretermékek bioesszé-vezérelt izolálása a magas aranyvessző (*Solidago gigantea* Ait.) különböző szerveiből

Baglyas Márton[1,2], Bozsó Zoltán[1], Schwarczinger Ildikó[1], Ott G. Péter[1], Bakonyi József[1], Dlauchy Dénes[3], Darcsi András[4], Varga Szilárd[5], Móricz M. Ágnes[1,2]

[1] *HUN-REN Agrártudományi Kutatóközpont Növényvédelmi Intézet, Növényi Kórélettani Osztály, Budapest*
[2] *Semmelweis Egyetem Doktori Iskola, Budapest*
[3] *Magyar Agrár- és Élettudományi Egyetem, Élelmiszertudományi és Technológiai Intézet, Mezőgazdasági és Ipari Mikroorganizmusok Nemzeti Gyűjteménye, Budapest*
[4] *Nemzeti Népegészségügyi és Gyógyszerészeti Központ, Gyógyszerészeti Laboratóriumi Főosztály, Gyógyszerkémiai és Technológiai Laboratórium, Budapest*
[5] *HUN-REN Természettudományi Kutatóközpont Szerves Kémiai Intézet, Organokatalízis Kutatócsoport, Budapest*

A magas aranyvessző (*Solidago gigantea* Ait.) Európában az egyik legagresszívebben terjedő inváziós növényfaj, amelyet ugyanakkor kedvező farmakológiai hatásai (vizelethajtó, gyulladáscsökkentő, antioxidáns, görcsoldó) miatt a fitoterápiában alkalmaznak. A széles körű biológiai aktivitásáért felelős vegyületek azonosítása azonban hiányos a szakirodalomban.

Jelen átfogó munkában ezért célul tűztük ki a *S. gigantea* gyökerében, levelében és virágzatában előforduló antimikrobiális vegyületek kimutatását, jellemzését, izolálását és szerkezetmeghatározását. Nemcélzott, hatás irányította szűrésükre vékonyréteg kromatográfiával csatolt direkt bioautográfiát (TLC–DB) alkalmaztunk. A bioesszé-vezérelt frakcionálást és izolálást többlépéses preparatív flash oszlopkromatográfia és félpreparatív, fordított fázisú nagyhatékonyságú folyadékkromatográfia (RP-HPLC) segítségével hajtottuk végre. Az izolált vegyületek *in vitro* antibakteriális és antifungális aktivitását mikrolemezes esszékkel értékeltük növényi kórokozó mikroorganizmusok bevonásával.

A *S. gigantea* gyökeréből négy (köztük három új), a leveléből öt (köztük egy új), míg a virágzatából két új másodlagos anyagcseretermékét izoláltunk [1,2,3]. A hat újonnan leírt vegyület klerodán diterpén, az öt ismert vegyület közül négyet elsőként azonosítottunk a fajban. Mind a 11 izolált vegyület *B. subtilis* baktérium elleni antibakteriális aktivitását TLC–DB módszerrel igazoltuk. A szolidágódiol bizonyult a legaktívabb vegyületnek a legtöbb Gram-pozitív növénypatogén baktériummal szemben. Erős gátlást (MIC = 2,1 µg/ml) és mérsékelt baktericid (MBC = 33 µg/ml) hatást mutatott *Clavibacter michiganensis* baktériummal szemben, de jelentős antibakteriális aktivitást (MIC = 8,3 µg/ml) tapasztaltunk *Curtobacterium flaccumfaciens* pv. *flaccumfaciens* baktériummal szemben is. Egy furanoditerpén alkohol szintén erős baktériumellenes hatást (MIC = 2,1 µg/ml) fejtett ki *C. michiganensis* baktériummal szemben. Gyenge antifungális hatását találtuk a szolidágósav C-nek, D-nek, K-nak és a szolidágódiolnak *Fusarium graminearum* ellen, illetve a szolidágósav C-nek és D-nek *Bipolaris sorokiniana* ellen.

Eredményeink alátámasztják a TLC–DB-vel irányított frakcionálás és izolálás hatékonyságát az új, természetes antimikrobiális hatóanyagok felfedezésében. Az izolált vegyületek ígéretes vezérmolekulái lehetnek jövőbeli fenntartható, környezetbarát növényvédőszerek fejlesztésének.

A munka az NKFIH OTKA K128921 és SNN139496 pályázat támogatásával készült.

[1] Baglyas et al. *Antibiotics* **2026**, *15*(7), 687. https://doi.org/10.3390/antibiotics150706874
[2] Baglyas et al. *IJMS* **2025**, *26*(18), 9187. https://doi.org/10.3390/ijms26189187
[3] Baglyas et al. *Plants* **2025**, *14*(14), 2152. https://doi.org/10.3390/plants14142152

E-13 | Gluténmentes pékáru táplálkozási értékének növelése: a fehérjedúsítás és az almatörköly-kivonat hatása a fehérjeminőségre

Tormási Judit[1], Koharek Anna[2], Ana Blanco-Doval[3], Cedric Brügger[3], Eliane Binz[3], Charlotte Egger[3], Reto Portmann[3], Abrankó László[1]

[1] *Magyar Agrár és Élettudományi Egyetem, Élelmiszertudományi és Technológiai Intézet Élelmiszerkémia és Analitika Tanszék Budapest*

[2] *Cambridge University, Christ's College, Cambridge, United Kingdom*

[3] *Agroscope, Research Group Biochemistry of Milk and Microorganisms, Posieux, Switzerland*

A gluténmentes élelmiszerek iránti kereslet az egészségtudatos fogyasztók körében is növekszik, ami a gluténmentes gabonafélék és álgabonák szélesebb körű alkalmazását eredményezte. Ezek az alapanyagok általában alacsonyabb fehérje- és magasabb szénhidráttartalmúak, a gluténháló hiánya pedig gyakran kedvezőtlen glikémiás tulajdonságokkal jár. A glikémiás index csökkentésének egyik lehetősége a fehérjetartalom növelése és bioaktív vegyületek, például polifenolok alkalmazása. Ugyanakkor ezek a beavatkozások nemcsak a keményítő emészthetőségét, hanem a termék fehérjeminőségét is befolyásolják. Jelen kutatás ezért a gluténmentes termékek fehérjeminőségének és peptidomikai jellemzőinek vizsgálatára fókuszál.

A gluténmentes, kukoricaliszt alapú pékáruk kétféle tejfehérje-koncentrátum (20%; MPC és megnövelt DIAAS-ú iMPC) és egy polifenolokban gazdag almatörkölykivonat (1%; POE) adagolásával készültek, standard recept alapján. A termékeket in vitro INFOGEST emésztésszimuláció után vizsgáltuk. A proxy-DIAAS értéket UHPLC-FLD aminosav-analízissel, az emésztés során keletkező peptideket pedig LC-MS/MS módszerrel vizsgáltuk. Az eredmények értékeléséhez referenciaként fehérkenyeret és kontrollként kukoricakenyeret alkalmaztunk.

Emészthetőség szempontjából nem volt szignifikáns különbség a termékek között (ANOVA; $p=0,139$), minden minta fehérjetartalma közel teljes mértékben emésztődött. Ugyanakkor a fehérjedúsítás jelentősen növelte a termékek fehérjetartalmát és fehérjeminőségét. A fehérjedúsított termékek esetében a fehérjetartalom ~150%-kal nagyobb volt (~9 g/100 g), mint a kiindulási termékben (~3 g/100 g). Emellett az aminosavprofil alapján számolt proxy-DIAAS is több mint a duplája ezeknél a termékeknél. A proxy-DIAAS érték a kukoricakenyér 40,83±0,36-os értékéről 80,75±1,10re (+MPC), illetve 89,28±0,33-ra (+IDEAAL®) emelkedett, ami az IDEAAL® kedvezőbb aminosav-összetételére utal. Az eredmények alapján az is megfigyelhető, hogy a hozzáadott bioaktív komponenseket tartalmazó POE kivonat jelentősen csökkentette a fehérjeminőséget (t próba: $p<0,001$), ami a proxy-DIAAS értékek szignifikáns csökkenésében is megmutatkozott (+MPC+POE: 70,93±0,10 (Trp); +IDEAAL®+POE: 80,03±0,10 (Trp). A csökkenés ellenére a minták továbbra is jó minőségű fehérjeforrásnak tekinthetők (DIAAS >75).

E-14 | Ionfolyadékok a szénhidrát-analitikában: módszerfejlesztéstől a növényi italok vizsgálatáig

Madarászné Horváth Ibolya, Makszin Lilla, **Páger Csilla**

Bioanalitikai Intézet, Általános Orvostudományi Kar, Pécsi Tudományegyetem, Pécs

A semleges szénhidrátok kapilláris elektroforézissel történő meghatározását gyenge UVabszorpciójuk nehezíti. Az imidazólium-alapú ionfolyadékok indirekt UV-detektálást és derivatizálás nélküli meghatározást tesznek lehetővé.

Munkánk célja egy ionfolyadék-alapú kapilláris elektroforézis módszer optimalizálása, validálása és alkalmazása volt növényi italok szénhidrátprofiljának vizsgálatára. A módszerfejlesztés során tanulmányoztuk az ionfolyadék típusának és koncentrációjának, a NaOH-koncentrációnak, az alkalmazott feszültségnek és a hőmérsékletnek az elválasztásra gyakorolt hatását. A módszer kilenc mono- és diszacharid – szacharóz, laktóz, maltóz, Dgalaktóz, D-glükóz, D-arabinóz, D-mannóz, D-fruktóz és D-ribóz – egyidejű meghatározását teszi lehetővé.

A korábban optimalizált módszer validálása során minden vizsgált szénhidrátra meghatároztuk a kalibrációs egyenes egyenletét és determinációs együtthatóját, valamint a kimutatási és meghatározási határt. A napon belüli ismételhetőséget egy 6 mM-os standardoldat tíz egymást követő mérésével, a napok közötti precizitást pedig különböző napokon végzett mérésekkel értékeltük. A kalibrációs összefüggések az alkalmazott mérési tartományban megfelelő linearitást mutattak. Az ismételhetőséget és a napok közötti precizitást a migrációs idő és a csúcsterület relatív szórásával jellemeztük.

A validált módszert négy, kereskedelmi forgalomban kapható növényi ital elemzésére alkalmaztuk. A mintákban azonosított cukrok esetében a napok közötti precizitást is értékeltük. Az egyes cukrok mért koncentrációinak összegét összevetettük a termékek tápértékjelölésén az „amelyből cukrok” megnevezés mellett feltüntetett értékkel. A mért és a címkén jelzett cukortartalom közötti relatív eltérés valamennyi vizsgált terméknél 20% alatt maradt. Eredményeink alapján a módszer gyors, megbízható, egyszerű mintaelőkészítést igénylő és derivatizálás nélküli lehetőséget kínál növényi italok cukorprofiljának meghatározására.

Köszönetnyilvánítás

A munkát a Pécsi Tudományegyetem Rektori Tudományos Pályázat (003_2026_PTE_RK/22) és a Bolyai János Kutatási Ösztöndíj (BO/00313/25) támogatta.

E-15 | Zöld oldószerek és új megközelítések az enantioszelektív folyadékkromatográfiában

lisz István, Németi Gábor, Péter Antal, Berkecz Róbert

Szegedi Tudományegyetem, Gyógyszeranalitikai Intézet, Szeged

A királis vegyületek – különösen a gyógyszeripari hatóanyagok – előállítása és minőségellenőrzése során az enantioszelektív folyadékkromatográfia az egyik legfontosabb elválasztástechnikai módszer. A hagyományos folyadékkromatográfiás eljárások ugyanakkor gyakran jelentős mennyiségű illékony szerves oldószer (pl. acetonitril, hexán, heptán stb.) felhasználásával járnak, ami egyre kevésbé egyeztethető össze a zöld kémia és a fenntartható analitikai módszerfejlesztés alapelveivel. Az elmúlt évek kutatásai ezért egyre nagyobb figyelmet fordítanak a kromatográfiás, ezen belül az enantioszelektív elválasztások környezeti terhelésének mérséklésére. A közelmúlt módszerfejlesztései számos lehetőséget kínálnak a folyadékkromatográfiás elválasztások oldószer- és energiaigényének, valamint hulladékképződésének csökkentésére.

Az egyik fontos irány a szuperkritikus vagy ahhoz közeli állapotú szén-dioxidot mozgófázisként alkalmazó SFC. A szén-dioxid alapú mozgófázis gyors és hatékony elválasztásokat tesz lehetővé, miközben jelentősen csökkenthető a szerves oldószerek felhasználása. A felhasznált oldószermennyiség csökkentésének másik lehetősége a nagy hatékonyságú, illetve ultranagyhatékonyságú folyadékkromatográfiás módszerek alkalmazása. Az említettek mellett kézenfekvő megoldás a hagyományosan alkalmazott oldószerek kevésbé veszélyes és kisebb környezeti terhelést jelentő alternatívákkal történő helyettesítése. Az alkoholok, elsősorban az etanol alkalmazására épülő módszerek mellett új lehetőségeket kínálnak a nem hagyományos oldószerek, köztük az ionos folyadékok, valamint az úgynevezett zöld oldószerek, például a propilén-karbonát és a dimetil-karbonát. Az előadás az enantioszelektív folyadékkromatográfiás elválasztások környezeti terhelésének csökkentésére irányuló főbb lehetőségeket tekinti át, középpontba állítva az alternatív oldószerek alkalmazását. Bemutatja, hogy a hagyományos oldószerek kiváltása, illetve az új kromatográfiás megközelítések milyen lehetőségeket kínálnak a fenntarthatóbb elválasztások kialakítására, és különös figyelmet fordít arra, hogy a környezeti terhelés csökkentése miként egyeztethető össze a nagy szelektivitású és hatékony enantioszelektív elválasztások követelményeivel.

Köszönetnyilvánítás

A TKP2021-EGA-32 számú projekt a Kulturális és Innovációs Minisztérium Nemzeti Kutatási Fejlesztési és Innovációs Alapból nyújtott támogatásával, a TKP2021-EGA pályázati program finanszírozásában valósult meg.

E-16 | Molekuláris hálózatok az embrionális fejlődésben

Ung Éva Amara, Varga Luca, Horváth Dániel, **Márk László**

Pécsi Tudományegyetem, Biokémiai és Orvosi Kémiai Intézet, Pécs

E-17 | Lineáris poliakrilamiddal bevont kapilláris kialakítása és alkalmazása fehérjék kapilláris zónaelektroforetikus elválasztására

Andrási Melinda, Zagyi Bálint, Narmin Hamidli, Nagy Cynthia, Szabó Ruben, Gayatri Vishwakarma, Gáspár Attila

Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék, Debreceni Egyetem, Debrecen

A fehérjék kapilláris zónaelektroforézissel (CZE) történő elválasztását jelentősen megnehezítheti a kapillárisfalon fellépő adszorpció, amely az elválasztási hatékonyság csökkenéséhez és a reprodukálhatóság romlásához vezethet. E probléma mérséklésére fehérjeanalitikai alkalmazásokban dinamikus vagy statikus polimerbevonattal rendelkező kapillárisok alkalmazása javasolt.

Munkánk során lineáris poliakrilamiddal (LPA) bevont kapillárisok alkalmazhatóságát vizsgáltuk fehérjék CZE-elválasztására, különös tekintettel a bevonási eljárás optimalizálására. Öt, az alkalmazott hőmérséklet és inkubációs idő tekintetében eltérő bevonási eljárást hasonlítottunk össze. Az LPA-bevonat minőségét semleges EOF-marker, valamint három, molekulaméretükben és pK-értékükben jelentősen eltérő fehérjét – inzulint, hemoglobint és rituximabot – tartalmazó modellkeverék elemzésével értékeltük. Eredményeink alapján a 60 °C-on végzett, rövidített bevonási eljárás a kapilláris előkészítését jelentősen egyszerűsíti és lerövidíti, miközben megfelelő elválasztási hatékonyságot és reprodukálhatóságot biztosít. Az optimalizált LPA-bevonat alkalmazásával a rituximab töltésvariánsai, valamint a hemoglobin alegységei hatékonyan elválaszthatók voltak. A bevonat stabilitását legalább száz egymást követő futtatás során igazoltuk.

Az optimalizált LPA-bevonatú kapillárist ezt követően különböző eredetű és tulajdonságú fehérjék, többek között karboanhidráz II, Escherichia coli DNS-polimeráz I, humán IGF-I, humán tioredoxin, Staphylococcus aureus Protein A/G és Streptococcus dysgalactiae Protein G, valamint kígyóméregminták komponenseinek elválasztására is sikeresen alkalmaztuk. Az eredmények alapján az optimalizált LPA-bevonat sokoldalúan alkalmazható különböző fehérjeanalitikai feladatokban. Különösen előnyös lehet olyan esetekben, amikor egy adott fehérje különböző variánsainak vagy formáinak szelektív elválasztása a cél.

Ezt a munkát a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Hivatal (K142134) támogatta.

[1] Andrási M., Zagyi B., Hamidli N.; Chromatographia 86, 659-668 (2023)
[2] Hamidli N., Andrási M., Nagy C., Gáspár A.; Journal of Chromatography A 1654, 1-9, 462448 (2021)
[3] Nagy C., Andrási M., Hamidli N., Gyémánt Gy., Gáspár A.; Journal of Chromatography Open 2, 100024 (2022)

E-18 | Online elektrokinetikus mintaelőkészítés és új elválasztási séma APTS-jelölt szénhidrátok kapilláris zónaelektroforéziséhez

Járvás Gábor[1], Farsang Róbert[1], Hogyor Kinga[1], Guttman András[1,2]

[1] *Pannon Egyetem, Veszprém*
[2] *Debreceni Egyetem, Debrecen*

A kapilláris elektroforézis az egyik leggyakrabban alkalmazott módszer komplex szénhidrátok elválasztására, azonban az APTS-el történő származékképzés során az alkalmazott reagens nagy feleslege miatt a hagyományos, alacsony pH-jú háttérelektrolittal történő elválasztás előtt rendszerint külön mintatisztítási lépés elvégzése szükséges. Ez azonban jelentős manuális laboratóriumi munkát és potenciális mintaveszteséget jelent.

Az előadásban bemutatásra kerülő munkánk során lúgos pH-jú, 150 mM kapronsavat és 253 mM TRIS összetételű puffert alkalmaztunk normál polaritású kapilláris zónaelektroforézis során [1]. Az elektroozmotikus áramlás és az ellenirányú elektroforetikus migráció megfelelő beállításával az APTS-jelölt szénhidrátok a detektor felé haladtak, míg a szabad, el nem reagált APTS nem jut be a kapillárisba, így megvalósul az online elektkinetikus mintatisztítás.

A módszer teljesítőképességét maltooligoszacharid létrán, majd humán szérum N-glikán mintán mutatjuk be. A konvencionális, alacsony pH-jú módszerhez hasonló elválasztási teljesítmény mellett az új eljárás futtatási ideje mintegy 35%-kal csökkent, illetve a külön tisztítási lépés elhagyhatóvá vált. Az új megközelítés egyszerűbb, gyorsabb és potenciálisan kisebb mintaveszteséggel járó N-glikán elemzést tesz lehetővé [2].

[1] Farsang R, Hogyor K, Jarvas G, Guttman A. Capillary Zone Electrophoresis of 8-Aminopyrene-1,3,6-trisulfonic Acid Labeled Carbohydrates with Online Electrokinetic Sample Cleanup. Anal Chem. 2023 Nov 14;95(45):16459-16464. doi: 10.1021/acs.analchem.3c03714.

[2] Farsang R, Jarvas G, Guttman A. Purification free N-glycan analysis by capillary zone electrophoresis: Hunt for the lost glycans. J Pharm Biomed Anal. 2024 Jan 20;238:115812. doi: 10.1016/j.jpba.2023.115812.

E-19 | Mikrochip gélelektroforézis alkalmazása speciális gyógyászati célra szánt élelmiszerek fehérjetartalmának jellemzésére

Balogh-Hartmann Fruzsina[1,2], Páger Csilla[1], Marosvölgyi Tamás[1], Makszin Lilla[1]

[1] *Bioanalitikai Intézet, Általános Orvostudományi Kar, Pécsi Tudományegyetem, Pécs*
[2] *Gyógyszerészi Kémiai Intézet, Gyógyszerésztudományi Kar, Pécsi Tudományegyetem, Pécs*

A speciális gyógyászati célra szánt élelmiszerek (FSMP-k) fogyasztása az elmúlt években jelentősen növekedett. Fehérje- és egyéb nitrogéntartalmú komponenseinek pontos jellemzése különösen fontos lehet a speciális táplálkozási igényű fogyasztók, köztük a krónikus vesebetegségben szenvedők számára, akik esetében a fehérje- és nitrogénbevitel monitorozása kiemelt jelentőségű. A hagyományos, összes nitrogéntartalmon alapuló fehérjemeghatározási eljárások ugyan mennyiségi információt szolgáltatnak, azonban nem teszik lehetővé a termékek fehérjeprofiljának részletes jellemzését. Kutatásunk célja egy mikrochip gélelektroforézis módszer optimalizálása és validálása volt speciális gyógyászati célra szánt élelmiszerek fehérjeprofiljának, valamint primer aminocsoportot tartalmazó komponenseinek (PAC) meghatározására. Az optimalizált módszert összesen 88 FSMP-minta vizsgálatára alkalmaztuk, az elektroforetikus profilokat kvalitatív és kvantitatív szempontból egyaránt értékeltük. A minták fehérjeprofilja és a PAC-tartalma jelentős változatosságot mutatott, amely összefüggésben állt a termékek célcsoportjával, fizikai formájával és formulációs sajátosságaival. Számos termék esetében a mért PAC-koncentráció meghaladta a címkén feltüntetett névleges fehérjetartalmat. Ez az eltérés arra utalhat, hogy a vizsgált készítményekben a fehérjék mellett további, primer aminocsoportot tartalmazó, nem fehérjeeredetű komponensek is hozzájárulnak a mért PAC-tartalomhoz. Eredményeink alapján a mikrochip gélelektroforézis hatékony kiegészítője lehet a hagyományos fehérjeanalitikai módszereknek. A fehérjeprofilok és a PAC-tartalom együttes értékelése a teljes fehérjetartalom meghatározásánál részletesebb információt nyújthat a különböző élelmiszermátrixok összetételéről, ezáltal hozzájárulhat a speciális gyógyászati célra szánt élelmiszerek pontosabb minőségértékeléséhez és táplálkozás-élettani jellemzéséhez.

Köszönetnyilvánítás

A munkát a *Bolyai János Kutatási Ösztöndíj (BO/00313/25)* és a *Pécsi Tudományegyetem Kutatási Alap Pályázat (003_2026_PTE_RK/1)* támogatta.

E-20 | Amikor a tömeg már nem elég: a retenciós idő szerepe a glikopeptid-azonosításban

Révész Ágnes, Szabó Dániel, **Drahos László**

HUN-REN Természettudományi Kutatóközpont, Budapest

Helyspecifikus glikozilációs mintázat kvantitatív meghatározása során sok glikoform MS/MS-spektruma nem elég intenzív a szerkezetmeghatározáshoz. Ezekben az esetekben az MS1-alapú azonosítás nélkülözhetetlen, azonban ennek megbízhatósága nem ismert. Becslésére különböző módszerek léteznek, például a +11 Da-val eltolt decoy-keresésre épülő hamis találati arány (FDR), azonban hogy ez a becslés intakt glikopeptidekre mennyire pontos, azt eddig szisztematikusan nem vizsgálták.

Munkánk során egyrészt megvizsgáltuk a +11 Da-s decoy-stratégia megbízhatóságát, másrészt a téves találatok megbízhatóbb kiszűrésére a tömegtől független információt, a retenciós időt használtuk fel. Fordított fázisú elválasztásnál egy peptid glikoformjainak retenciós ideje a glikán összetételével közel lineárisan változik. Módszerünkben a monoszacharid-összetételből relatív retenciós értéket (RRT) számolunk, és peptidenként robusztus illesztéssel egyenest illesztünk a glikopeptid-találatok retenciós idejére, így az egyes kiugró pontok nem torzítják. Minden jelöltnél azt vizsgáljuk, mennyire esik közel a többi glikoformra illesztett egyeneshez, és az egyenestől távoli jelöltek kisebb pontszámot kapnak. A módszer nagy előnye, hogy már néhány pont esetén is jól működik, és nem igényel MS/MS-alapú azonosítást.

A módszert az α1-savas glikoprotein (AGP) példáján teszteltük, amelynek glikozilációs mintázatát három laboratóriumban, eltérő készülékkel és mintamennyiséggel (5–200 ng) vizsgáltuk. Az AGP glikoformjai peptidenként jól definiált egyeneseket adtak. A valós hibaarányt úgy becsültük, hogy a keresésbe a mintában biztosan elő nem forduló jelölteket (idegen peptideket és biológiailag lehetetlen glikánokat) is felvettünk: az ezekre kapott találatok biztosan tévesek. Megállapítottuk, hogy az irodalomban használt +11 Da-s decoy-stratégia jelentősen (többszörösen) alulbecsüli a valós hibaarányt. A téves találatok döntő része nem hasonló tömegű glikán, hanem a zsúfolt spektrumban fellépő véletlen tömegegyezés eredménye volt. A retenciós idő vizsgálata ezen téves találatok jelentős részét kiszűrte. Eredményeink szerint a glikán-összetételből számolt relatív retenciós index egyszerű és kromatográfiásan jól megalapozott ellenőrzési lehetőség az MS1-alapú glikopeptid-analízisben.

Köszönetnyilvánítás

Az előadás alapjául szolgáló eredmények egy részének mérése az Institute of Science and Technology Austria (ISTA) Scientific Service Units egységéhez tartozó LSF Mass Spectrometry Facility laboratóriumában történt.

E-21 | Pozitív töltés, anionos fragmentáció? Nátriumion-adduktok a bakteriális lipid A szerkezetvizsgálatában

Dörnyei Ágnes[1], Sándor Viktor[2], Kilár Anikó[2]

[1] *Pécsi Tudományegyetem, Természettudományi Kar, Analitikai és Környezeti Kémia Tanszék, Pécs*
[2] *Pécsi Tudományegyetem, Általános Orvostudományi Kar, Bioanalitikai Intézet, Pécs*

Az elektrospray-ionizáció során képződő nátriumion-adduktokat gyakran a protonált vagy deprotonált molekulák mellett megjelenő kísérőionoknak tekintjük. Ám tömegspektrometriás viselkedésük ennél jóval több lehetőséget rejt. A nátriumionok koordinációja befolyásolhatja a molekula gázfázisú szerkezetét, stabilitását és fragmentációs útvonalait, így a megfelelő adduktforma kiválasztása önálló módszerfejlesztési eszközzé válhat.

Kutatócsoportunk hosszú ideje foglalkozik a Gram-negatív baktériumok endotoxikus hatásáért felelős lipid A régió tömegspektrometriás szerkezetvizsgálatával. A lipid A molekulák szerkezeti változatossága alapvetően befolyásolja biológiai aktivitásukat, ugyanakkor komoly analitikai kihívást is jelent. A hasonló összetételű, de eltérő felépítésű változatok megkülönböztetéséhez nem elegendő csupán a molekulatömeg meghatározása, hanem az egyes prekurzorion-formák fragmentációs mintázatában rejlő információt is tudatosan kell használni.

Munkánkban azt vizsgáltuk, miként változik a lipid A molekulák ütközésindukált disszociációja (CID), ha a protonált molekula helyett egy vagy több nátriumiont tartalmazó prekurzoriont választunk. A korábbi, monofoszforilált lipid A vegyületeken végzett vizsgálatainkat ezúttal penta-, hexa- és heptaacilált, biszfoszforilált lipid A molekulák pozitív ionmódú, energiafüggő CID analízisével egészítettük ki.

A kétszeres nátriumion-adduktok különösen érdekes határterületet jelentenek a pozitív és negatív ionmódú fragmentáció között. A deprotonált molekula további nátriumionok megkötésével pozitív ionként detektálható, miközben a megmaradó anionos centrum továbbra is befolyásolhatja a fragmentációt. Más foszfáttartalmú lipideknél is megfigyelték, hogy a pozitív módban detektált, többszörösen alkálifém-kationizált ionok részben megőrizhetik a deprotonált forma fragmentációs sajátosságait. Ez egy izgalmas általános kérdést vet fel: vajon a fragmentációt az ion össztöltése határozza meg, vagy sokkal inkább a töltések molekulán belüli eloszlása?

Az előadásban bemutatjuk, hogyan használhatók fel a különböző nátriumtartalmú ionformák a lipid A szerkezetének feltérképezésére, és milyen szerepet játszik ebben az ütközési energia megválasztása. Eredményeink arra is felhívják a figyelmet, hogy az adduktok nem feltétlenül zavaró melléktermékek: tudatos vizsgálatukkal eddig rejtett szerkezeti információk is hozzáférhetővé válhatnak.

E-22 | Inzulin deamidációs helyeinek meghatározása ütközés-indukált disszociációs technikával nyert belső fragmensek segítségével

Szabó Ruben, Nagy Cynthia, Gáspár Attila

Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék, Debreceni Egyetem, Debrecen

A cukorbetegség előfordulásának globális növekedésével az inzulinanalógok széles köre vált a kereskedelmi forgalomban elérhetővé és a terápiás protokollok szerves részévé. Ezek kémiai és szerkezeti stabilitásának meghatározása kulcsfontosságú, mivel ezen gyógyszerhatóanyagok hosszútávú biztonságossága és hatásossága biológiai és kémiai degradációhoz kötődhet. Ilyen például a glutamin, illetve aszparagin oldalláncainak deamidációja [1]. A különböző inzulinanalógok dezamidációjának pontos helyei, illetve annak mértéke sok esetben ma sem ismert részletesen. Ennek megfelelően elengedhetetlen a deamidált formák azonosítása, valamint azok lehetséges élettani hatásainak vizsgálata [2].

Kutatócsoportunk korábban kapilláris zónaelektroforézissel sikeresen választotta el a különböző inzulinanalógok deamidált formáit egymástól, valamint az eredeti hatóanyagtól [3]. A deamidált inzulin variánsok tandem tömegspektrometriás fragmentációját ütközés-indukált disszociációval (CID) valósítottuk meg. A CID az egyik legelterjedtebb fragmentációs technika, azonban jelen esetben hatékonyságát erősen korlátozza az inzulin szerkezete: a diszulfidkötések által határolt régión belüli fragmentáció nem változtatja meg az eredetileg fragmentáció nélkül mért *m/z* értéket, mivel a várt fragmenseket a diszulfidkötések egyben tartják. Ezen régión kívül a terminális fragmensek lehetővé teszik a deamidációs helyek egy részének egyértelmű azonosítását, azonban a fennmaradó helyek meghatározásához megfelelő, belső fragmensek kiválasztása volt szükséges, melyek csak nagyon csekély mennyiségben fordulnak elő jellemzően. A savas közegű kényszerített degradációs mintákban a deamidált formák mellett kovalens oligomerek megjelenését is megfigyeltünk, melyet Taylor Diszperziós Analízis segítségével is alátámasztottunk.

[1] G. Wilcox, Clin. Biochem. Rev. 2005, 26, 19.
[2] D. Gervais, J. Chem. Technol. Biotechnol. 2016, 91, 569-575.
[3] M. Andrasi, B. Pajaziti, B. Sipos, C. Nagy, N. Hamidli, A. Gaspar, J. Chromatogr. A. 2020, 1626, 461344.

E-23 | Mikotoxinok mennyiségi meghatározása follikuláris folyadékból LC-MS módszerrel

Lambert Nándor[1], Szőke Zsuzsanna[2], Sára Levente[3], Poór Miklós[4], Gyenesei Attila[1]

[1] *Pécsi Tudományegyetem Szentágothai Kutató Központ, Omikai Központ, Pécs*
[2] *MATE, Genetika és Biotechnológia Intézet, Gödöllő*
[3] *Semmelweis Egyetem, Szülészeti és Nőgyógyászati Klinika, Budapest*
[4] *Pécsi Tudományegyetem Laboratóriumi Medicína Intézet, Pécs*

Az utóbbi évek kutatásai az *Aspergillus* és *Fusarium* fajok által termelt mikotoxinok közegészségügyi kockázatai mellett azok reprodukciós folyamatokra, és ezáltal a fertilitásra gyakorolt negatív hatásaira is rávilágítanak. A zearalenon (ZEN) és metabolitjai, különösen az α-zearalenol, ösztrogénszerű hatásuk révén befolyásolhatják a hormonális szabályozást és a granulózasejtek működését, míg az aflatoxinok, az ochratoxin A (OTA), a fumonizinek és a trichotecének – köztük a T-2 és HT-2 toxinok, valamint a deoxinivalenol (DON) – oxidatív stresszt, sejtkárosodást és apoptózist idézhetnek elő (Minervini et al., 2006; Szentirmay et al., 2024; Sajjad et al., 2025).

A tüszőfolyadék a petesejt fejlődéséhez és éréséhez nélkülözhetetlen mikrokörnyezet, amelynek összetétele befolyásolhatja a peteérési folyamatokat, és ezáltal a fejlődő petesejt minőségét is. Korábbi, in vitro fertilizációhoz (IVF) kapcsolódó kutatások egyes mikotoxinok magasabb koncentrációját írták le a tüszőfolyadékban a vérszérumhoz képest, valamint összefüggéseket mutattak ki bizonyos toxinok, a reprodukciós paraméterek és a follikuláris hormonszintek között (Szentirmay et al., 2024; Szőke et al., 2025).

Kutatómunkánk célja egy olyan LC-QqQ-MS-módszer kidolgozása és validálása, amely alkalmas a szabályozás alatt álló mikotoxinok (aflatoxinok, fumonizinek, T-2 és HT-2 toxinok, ZEN, DON és OTA) meghatározása mellett a kevésbé kutatott, de potenciálisan jelentős toxicitású komponensek, így a citrinin, a szterigmatocisztin és az alternariol-metiléter mennyiségi meghatározására is follikuláris folyadékból. A célvegyületek dúsítása és a mátrixhatás csökkentése érdekében szilárd fázisú extrakciós módszert dolgoztunk ki, és izotóppal jelölt kísérő standardokat alkalmaztunk. A kísérlet során vizsgált hatvan IVF-kezelésen átesett páciens tüszőfolyadékának mindegyikében kimutatható volt valamilyen mikotoxin jelenléte.

[1] Szentirmay A, Molnár Z, Plank P, et al. The Potential Influence of the Presence of Mycotoxins in Human Follicular Fluid on Reproductive Outcomes. Toxins. 2024;16(12):509.
[2] Szőke Z, Ruff E, Plank P, et al. Mycotoxin-Induced Oxidative Stress and Its Impact on Human Folliculogenesis: Examining the Link to Reproductive Health. Toxins. 2025;17(12):574.
[3] Minervini F, Giannoccaro A, Fornelli F, et al. Influence of mycotoxin zearalenone and its derivatives (alpha and beta zearalenol) on apoptosis and proliferation of cultured granulosa cells from equine ovaries. Reproductive Biology and Endocrinology. 2006;4:62. https://doi.org/10.1186/1477-7827-4-62
[4] Sajjad Y, Dib J, Soliman N, et al. The Role of Mycotoxins in Reproductive Health: Mechanisms, Evidence, and Clinical Implications. Journal of IVF-Worldwide. 2025;3(1):42–55.

RÖVID TANFOLYAMOK

RT-01 | Kézműves kutatás MI-vel – hatásos, hatékony vagy értékes?

Abonyi János

Pannon Egyetem, Veszprém

A „kézműves” felirat ma a minőség ígérete, a hamburgeren is. A kutatásban sokan ugyanígy gondolják: ami kézzel készül, az hiteles, ami géppel, az gyanús. Közben két év alatt a nyelvi modell beszélgetőtársból munkatárssá vált: irodalmat dolgoz fel, kódot ír és futtat, adatbázisokat kérdez le, kéziratot fogalmaz és bírál. Ha a közlemény előállítása olcsóvá válik, mit jelez még egy publikáció, mit bírál a bíráló, és mi a doktori képzés dolga?

Az előadás állást foglal: a kézimunka önmagában nem érték, a jól használt MI viszont maga is kézműves eszköz, amelyben a kutató módszere és gondolatisága és értékvállalása dolgozik. Lehetővé teszi, hogy nagyobb, összetettebb kérdésekbe vágjunk, és nagyobb lépésekben haladjunk; ez a lépés azonban csak akkor hoz valódi, társadalmi hatást, ha megbízható: nyílt adatra, futtatható kódra, visszakövethető eredetre és vállalt felelősségre épül. Saját munkafolyamatomon és élő bemutatón (Claude Science és társai) megmutatom, mire képes ma az MI-alapú kutatói környezet az ötlettől az ellenőrzött eredményig, és hol hibázik. A friss nemzetközi eredmények szerint az MI-t használó kutatók több cikket írnak és több hivatkozást kapnak. A kérdés tehát nem az, hogy hatásosabbak és hatékonyabbak leszünk-e, hanem az, hogy értékesebbek-e. Ennek szellemében arról is beszélünk, hogyan segíthet a megfelelő irány tartásában a CoARA kutatásértékelés és a nyílt tudomány és egy olyan megújuló tudományos utánpótlás képzés, amelyben a kézművesség helye a kérdés megválasztása, a megbízhatóság megtervezése, a kritikus gondolkodás, és társadalmi hasznosság folyamatos szem előtt tartása.

RT-02 | A megbízható UHPLC–MS/MS mikroszennyező-analitika módszertani alapjai – a mintaelőkészítéstől a mátrixhatás kezeléséig

Maász Gábor

Soós Ernő Kutató-Fejlesztő Központ, Pannon Egyetem, Nagykanizsa

A vízi környezetben előforduló szerves mikroszennyezők UHPLC–MS/MS meghatározása olyan összetett analitikai feladat, amelyben a széles komponenskör, a nagy érzékenység és a megbízható kvantifikáció egyidejű biztosítása csak tudatos módszerfejlesztéssel érhető el. A továbbképző tanfolyam célja, hogy gyakorlati szemléletben mutassa be azokat a döntési pontokat és módszertani megoldásokat, amelyek meghatározzák a multikomponensű környezetanalitikai mérések minőségét. A kiindulópont a „mikroszennyező-analitika gyakorlati trilemmája”: minél több, egymástól jelentősen eltérő fizikai-kémiai tulajdonságú vegyületet kívánunk egyetlen módszerrel meghatározni, annál nagyobb jelentősége lesz a tudatos kompromisszumoknak és a teljes mérési folyamat kontrolljának.

A tanfolyam a teljes analitikai folyamatot végigköveti a mintavételtől és mintatárolástól a minta-előkészítésen, a kromatográfiás elválasztáson és az ESI–MS/MS detektáláson át a kvantifikációig. Kiemelt figyelmet kap a szűrés, a szilárd fázisú extrakció, a dúsítás és visszaoldás szerepe, valamint az, hogy ezek a lépések miként befolyásolják a visszanyerést és a mátrixhatást. Bemutatásra kerül a kromatográfiás oszlop, a szerves módosító és az eluensadditívek megválasztásának jelentősége, különös tekintettel az eltérő polaritású és sav–bázis tulajdonságú vegyületek egyidejű meghatározására. A résztvevők példákon keresztül ismerhetik meg, hogyan változhat a jelintenzitás, a csúcsalak és az adduktképződés az eluensösszetétel és az ionizációs körülmények módosításával. Szó lesz arról is, mikor indokolt a fordított fázisú elválasztást alternatív megoldással, például HILIC-megközelítéssel kiegészíteni.

Külön blokk foglalkozik a belső és kísérő standardok helyes megválasztásával. Tárgyaljuk az izotópjelölt analógok és a strukturálisan hasonló standardok előnyeit és korlátait, továbbá azt, hogy a retenció, az ionizáció, a fragmentáció és a mintafeldolgozási visszanyerés hasonlósága miként hat a kvantifikáció megbízhatóságára. Részletesen kitérünk a mátrixhatás felismerésére és mérésére, a jelcsökkenés és jelerősödés értelmezésére, valamint a hígítás, a dúsítás mértéke, az injektált térfogat, a mátrixhoz illesztett kalibráció és a belső standard korrekció szerepére.

A tanfolyam záró része a módszeralkalmasság és minőségbiztosítás gyakorlati elemeit foglalja össze: visszanyerés, ismételhetőség, reprodukálhatóság, linearitás, LOD/LOQ, QC-minták, procedural blankok és rendszeralkalmassági ellenőrzések. Víztisztítási és technológiai példák szemléltetik, hogy az eltérő mátrixok miért igényelhetnek eltérő analitikai megközelítést. A hangsúly nem egyetlen kész módszeren, hanem az általánosítható módszerfejlesztési gondolkodáson lesz. A képzés fő üzenete, hogy az

érzékeny műszer önmagában nem garantál jó adatot: a megbízható eredmény a teljes módszer tudatos, a konkrét mérési feladathoz igazított kialakításának eredménye.

POSZTEREK

P-01 | Új antimikrobiális szekodammarán típusú triterpének mirigyes bálványfa levélnyélből izolálva

Cselőtey Anna[1,2], Baglyas Márton[1,2], Aschenbrenner Panna[1], Bozsó Zoltán[1], Schwarczinger Ildikó[1], Bakonyi József[1], Darcsi András[3], Vesna Glavnik[4], Irena Vovk[4], Móricz M. Ágnes[1,2]

[1] *HUN-REN Agrártudományi Kutatóközpont, Növényvédelmi Intézet, Budapest*

[2] *Semmelweis Egyetem Doktori Iskola, Budapest*

[3] *Gyógyszerkémiai és Technológiai Laboratórium, Nemzeti Népegészségügyi és Gyógyszerészeti Központ, Budapest*

[4] *Laboratory for Food Chemistry, National Institute of Chemistry, Ljubljana, Slovenia*

A mirigyes bálványfa (*Ailanthus altissima* (Mill.) Swingle) hazánkban is előforduló, rendkívül agresszíven terjeszkedő invazív fafaj. Főleg utak mentén, mezők szélén és bolygatott területeken szaporodik el, amivel veszélyezteti az őshonos növénytársulásainkat. A belőle kinyerhető természetes vegyületek azonban számos kutatás alapját képezhetik.

Jelen munkánk célja a mirigyes bálványfa levélnyelében lévő antimikrobiális vegyületek izolálása, azonosítása és jellemzése volt. Ezeknek a feltérképezéséhez vékonyréteg-kromatográfiához csatolt direkt bioautográfiás módszert alkalmaztunk, *Bacillus subtilis* baktérium felhasználásával. Az aktív vegyületeket normál- és fordított fázisú preparatív flash kromatográfiás módszerekkel izoláltuk, nagy felbontású (tandem) tömegspektrometriával (HRMS(/MS)) jellemeztük, majd NMR-spektroszkópia és polarimetria segítségével azonosítottuk.

Összesen 3 szekodammarán típusú triterpént (shoreic sav (**1**), foveolin C (**2**), (20*S*,24*R*)-epoxi-25-hidroxi-A-homo-4-oxadammarán-3-on (**3**)) izoláltunk és azonosítottunk a levélnyél metanolos kivonatából, melyek közül a **2** és **3** új természetes vegyületeknek bizonyultak. Korábbi munkánk során a bálványfa kérgéből izolált hidroxilezett zsírsavszármazékokat (13-hidroxi-9,11-oktadekadiénsav, **4**; 9-hidroxi-10,12-oktadekadiénsav, **5**) is kimutattuk a levélnyélből HPLC–HRMS/MS módszerekkel. A vizsgált vegyületek (**1**–**5**) antimikrobiális hatását növénypatogén baktériumokkal (*Curtobacterium flaccumfaciens* pv. *flaccumfaciens*, *Clavibacter michiganensis*, *Rhodococcus fascians*) és gombával (*Fusarium graminearum*) szemben igazoltuk mikrohígításos módszerekkel. Legerősebb gátló hatás a shoreic sav esetén jelentkezett *C. michiganensis* és *R. fascians* baktériumokkal szemben, a **2**–**5** vegyületek főleg *R. fascians* baktériummal szemben voltak hatásosak.

Összességében elmondható, hogy a mirigyes bálványfa levélnyele tartalmaz antimikrobiális vegyületeket, amelyek alapjául szolgálhatnak a hatékony, mégis környezetbarát növényvédőszerek kifejlesztésének.

P-02 | Közönséges selyemkóró komponenseinek vizsgálata hatás-vezérelt eljárással

Tekula Szilárd[1,2], Bozsó Zoltán[1], Bakonyi József1, Móricz M. Ágnes[1,2,]

[1] *HUN-REN Agrártudományi Kutatóközpont Növényvédelmi Intézet, Növényi Kórélettani Osztály, Budapest*
[2] *Semmelweis Egyetem Doktori Iskola, Budapest*

Az Észak-Amerikából származó közönséges selyemkóró (Asclepias syriaca L.) a télizöldfélék (Apocynaceae) családjába tartozó lágyszárú növény, amely Európában jelentős inváziós fajként van jelen. Terjedése komoly ökológiai kockázatot jelent mivel sok repítőszőrös magja mellett a vegetatív szaporodása (gyökérsarjjal) is igen hatékony. Nektártermelő képességénél fogva jelenleg szinte csak mézelőként hasznosítják. Szakirodalmi adatok alapján bioaktív vegyületek ígéretes forrása, már az 1970-es években leírták többek között számos kardenolid komponensét.

Munkánk célja, hogy hatás-vezérelt módszerrel, vékonyréteg kromatográfia segítségével jellemezzük a selyemkóró különböző növényi részeiből készült kivonatokat, és az eredmények mentén elkezdjük a bioaktív, elsősorban antioxidáns, antimikrobiális és enzimgátló hatású komponensek karakterizálását.

A selyemkóró levél, szár, gyökér, termésfal és mag etil-acetáttal, metanollal és 80 V/V%-os vizes etanollal, ultrahangos extrakcióval készítettünk kivonatokat. Az elválasztást normál fázisú, TLC szilikagél F_{254} rétegen végeztük toluol, etil-acetát és metanol 5:4:1 térfogatarányú elegyével. A hatás tekintetében TLC–direkt bioautográfiás tájékozódó vizsgálatokat végeztünk. A kivonatok antibakteriális aktivitást Gram-pozitív Bacillus subtilis és Gramnegatív Aliivibrio fischeri, antifungális hatását Fusarium graminearum és Bipolaris sorokiniana szuszpenziós kultúrán figyeltük meg. Az antioxidáns hatást 2,2-difenil-1pikrilhidrazil felhasználásával, az enzimgátló tulajdonságot sertés hasnyálmirigy eredetű lipáz, élesztő eredetű alfa-glükozidáz és elektromos angolnából eredő acetilkolin-észteráz enzimeken végeztük.

P-03 | Almatörköly kivonat procianidin- és cukorprofiljának vizsgálata

Fábián Gábor János, Abrankó László

Magyar Agrár- és Élettudományi Egyetem, Élelmiszertudományi és Technológiai Intézet, Élelmiszerkémia és Analitika Tanszék, Budapest

Bevezetés és célkitűzés Az almalégyártás során jelentős mennyiségben keletkező melléktermék, az almatörköly kiváló forrása a bioaktív polifenoloknak, különösen a polimer flavan-3oloknak, azaz a procianidineknek. Bár az összes procianidintartalom becslésére széles körben alkalmazzák a BuOH-HCl hidrolízisen alapuló spektrofotometriás módszert, az nem nyújt részletes információt a molekulák polimerizáltsági fokáról és összetételéről. Ezzel szemben a gyengén savas közegben végzett floroglucinolízis lehetőséget teremt a polimerek szelektív depolimerizációjára: a reakció során a terminális egységek natív flavan-3-olként, míg az extenziós lánctagok stabil floroglucinol-adduktként hasadnak le. Jelen kutatás célja az ipari szárított almatörkölyből készített polifenol-kivonat procianidin- és cukorprofiljának részletes feltárása, valamint egy optimalizált, gyors és szelektív HPLC-DAD módszer kifejlesztése és részleges validálása a procianidin komponensek azonosítására és az átlagos polimerizáltsági fok (DP) meghatározására.

Anyag és módszer A vizsgálatokhoz ipari almatörkölyből 6:4=aceton:víz (V/V) eleggyel kivont, majd liofilezett extraktumot használtunk. A polimer procianidinek hasítását enyhe savas körülmény között, úgynevezett floroglucinolízissel végeztük el (floroglucinol, L-aszkorbinsav, 0,3 N HCl-metanol, 50 °C, 30 perc). A kromatográfiás elválasztás a procianidinekre és a cukrokra egyaránt Agilent 1200 HPLC készüléken diódasoros detektálással (280; 320; 420 nm), valamint törésmutató detektorral történt. A procianidinek esetében az irodalmi, 70 perces elválasztási protokollt (Malec et al., 2014) átdolgozva egy rövidebb, 50 × 2,1 mm-es (3,5 µm) C18 oszlopot alkalmaztunk 0,1%-os ecetsavas víz/acetonitril gradiens elúcióval és 0,4 ml/perc áramlási sebességgel, 28 percre csökkentve az analitikai futásidőt. A kromatográfiás módszerre elvégeztük a szelektivitás, linearitás (1–500 µg/ml), pontosság (visszanyerés), ismételhetőség, valamint a kimutatási és meghatározási határok (LOD, LOQ) vizsgálatát.

Eredmények és következtetések A kidolgozott kromatográfiás módszer kiváló szelektivitást mutatott: a kritikus komponenspár, a procianidin B2 és a (-)-epikatechin alapvonali elválasztása megvalósult (R_S = 1,54). A linearitás 5–500 µg/ml tartományban igazolt (R^2 > 0,99), a kimutatási határ (LOD) 0,5 µg/ml, a mennyiségi meghatározási határ (LOQ) 5,0 µg/ml lett. A pontossági tesztek 85– 115% közötti visszanyerést és 5% alatti relatív szórást (RSD) mutattak. A natív polifenol kivonatban jelenlévő monomereket és dimert azonosítva (+)-katechin (1,32± 0,04mg/g), (-)-epikatechin (2,17±0,07 mg/g) és procianidin B2 (1,01±0,02 mg/g) tartalmat mértünk. A floroglucinolízises reakciótermékek kiértékelésével kizárólag (-)-epikatechin és (-)-epikatechin-floroglucinol addukt keletkezése volt igazolható, ami rámutat arra, hogy az extraktum oligomer procianidinjei szinte kizárólag epikatechin egységekből épülnek fel. A moláris arányok alapján az

oligomerek átlagos polimerizáltsági foka DP = 3-nak adódott. Az almatörköly kivonat cukorprofiljának eredményei alapján a mintában a glükóz (82,8±3,72 mg/g) és früktóz (167,3±11,2 mg/g) volt meghatározható mennyiségben jelen.

A kifejlesztett, környezetkímélőbb és gyors analitikai protokoll hatékony eszközt nyújt az almatörköly, mint értékes bioaktív forrás élelmiszeripari újrahasznosításának és standardizált minőségellenőrzésének támogatására.

Malec, M., Le Quéré, J.-M., Sotin, H., Kolodziejczyk, K., Bauduin, R., Guyot, S., 2014. Polyphenol Profiling of a Red-Fleshed Apple Cultivar and Evaluation of the Color Extractability and Stability in the Juice. J. Agric. Food Chem. 62, 6944–6954. https://doi.org/10.1021/jf500336v

P-04 | Fehér mustár (*Sinapis alba*) és a görögszéna (*Trigonella foenum graecum*) mikrozöldek bioaktív komponenseinek vizsgálata

Róde Lea[1,2]

[1] *Eszterházy Károly Katolikus Egyetem, Biológia Intézet, Növényélettani Tanszék, Eger*
[2] *Magyar Agrár és Élettudományi Egyetem, Természettudományok Doktori Iskola, Gödöllő*

Az egészséges táplálkozás kiemelt fontosságú a modern orvostudomány és táplálkozástudomány területén, mivel a megfelelő étrend hozzájárul a betegségek prevenciójához, valamint az optimális életminőség fenntartásához. A mikrozöldek egyre népszerűbbé válnak a táplálkozási trendekben, hiszen tápláló és sokoldalú kiegészítései lehetnek a mindennapi életnek. A növények korai fejlődési szakaszában, a csírázás során vagy a fiatal növények állapotában, mikrozöld formában fogyaszthatók, melyek gazdag forrását képezik vitaminoknak, ásványi anyagoknak, antioxidánsoknak és más bioaktív vegyületeknek.

Jelen vizsgálat célja a mikrozöldek közül a fehér mustár (*Sinapis alba*) és a görögszéna (*Trigonella foenum graecum*) bioaktív komponenseire milyen hatással vannak a különböző hőkezelések, illetve a táplálkozási, egészségügyi aspektusainak részletes feltárása. A komponensösszetétel GCMS módszerrel történő meghatározása mellett különböző elveken alapuló más-más szabadgyököket alkalmazó módszerek segítségével átfogó jellemzést adni a vizsgált mikrozöldek aktuális antioxidáns kapacitásáról. A kettő vizsgált mikrozöld gazdag bioaktív komponensösszetételének felderítésére GCMS technikát alkalmaztunk BSTFA+TMCS származékképzés után. A kapott eredmények mind a fehér mustár, mind a görögszéna esetében kapcsolatot mutatnak az abiotikus stresszként alkalmazott hőkezeléssel. A különböző hőkezelések nem azonos hatással voltak a két növény esetében.

P-05 | Brokkoli mikrozöld bioaktív komponenseinek változása abiotikus stressz hatására

B. Tóth Szabolcs[1], Róde Lea[1,2]

[1] *Eszterházy Károly Katolikus Egyetem, Biológia Intézet, Növényélettani Tanszék, Eger*
[2] *Magyar Agrár és Élettudományi Egyetem, Természettudományok Doktori Iskola, Gödöllő*

A brokkoli mikrozöld (*Brassica oleracea* var. *italica*) a keresztesvirágú zöldségek közül az egyik legtöbbet kutatott funkcionális élelmiszer, mivel bioaktív fitovegyületei jelentős egészségvédő hatással bírnak. Legfontosabb hatóanyaga a glükorafanin nevű glükozinolát, amely a növényi szövetek sérülésekor – rágás vagy vágás hatására – a mirozináz enzim segítségével szulforafánná alakul át. Ez az izotiocianát-vegyület akár 10–100-szor nagyobb koncentrációban lehetnek jelen a néhány napos mikrozöldben, mint a kifejlett brokkolifejben. A szulforafán bizonyítottan képes aktiválni az Nrf2 jelátviteli útvonalat, amely beindítja a szervezet méregtelenítő és antioxidáns védelmi rendszerét. A mikrozöld fázisban a növény rendkívül gazdag polifenolokban, kvercetin- és kempferol-glikozidokban, amelyek szinergiában működnek a magas C- és E-vitamin-tartalommal az oxidatív stressz semlegesítésében. Ezen felül jelentős mennyiségben halmoz fel luteint és zeaxantint. Ásványianyag-profilját tekintve kiemelkedő a biohasznosuló kalcium-, magnézium-, kálium- és cinktartalma, amelyek támogatják a kardiovaszkuláris rendszert és a homeosztázis fenntartását. Rendszeres fogyasztása javítja az inzulinérzékenységet, csökkenti az LDL-koleszterinszintet, és támogatja a bél mikrobiom egészséges egyensúlyát.

A kutatás során abiotikus stressznek kitett brokkoli bioaktív komponensösszetételét vizsgáltuk GCMS módszerrel. A GCMS vizsgálathoz a minta feltárása, extrakciója után BSTFA+TMCS származékképzést alkalmaztunk. A bioaktív komponensösszetétel meghatározás kiegészítéseként antioxidáns kapacitás vizsgálatot is végeztünk különböző technikákkal. A kapott eredményeket értékelve jól láthatóan összefüggés mutatkozik az abiotikus stressz, az antioxidáns kapacitás és a bioaktív komponens összetétel között, vagyis az abiotikus stressz hatással van a bioaktív komponensösszetételre brokkoli mikrozöld esetében.

P-06| Mintamátrixok profilozása mogyorófélék esetében HPLC és IEXC módszerek alkalmazásával

Lukács Diána, Ulbert Olga, Horváth Krisztián

Pannon Egyetem, Természettudományi Központ, Analitikai Kémia Kutatócsoport, Veszprém

A növényi eredetű élelmiszer- és nyersanyagmátrixok összetettsége jelentősen befolyásolhatja az analitikai vizsgálatok eredményét. A különböző komponenscsoportok eltérő oldhatósága, polaritása és a mátrix egyéb alkotóival való kölcsönhatása miatt a megfelelő mintaelőkészítés alapvető jelentőségű a kromatográfiás vizsgálatok során. A mogyorófélék meglehetősen összetett, jelentős lipidtartalmú mátrixot alkotnak, amelynek vizsgálata többféle extrakciós és mintaelőkészítési lépés együttes alkalmazását igényli.

A vizsgálatok célja mogyoró- és mandulaminták, valamint azok barna belső héjának komplex mátrixprofilozása, különös tekintettel a mintaelőkészítési lépések hatására és az egyes extrakciós frakciók kromatográfiás jellemzésére. A laboratóriumi munka első szakaszában a mag- és héjőrlemények hexánnal történő zsírtalanítását vizsgáljuk. A zsírtalanítás több egymást követő extrakciós lépésben történik, lehetővé téve az egyes lépések hatékonyságának külön-külön történő meghatározását, valamint a lipideltávolítás folyamatának nyomon követését.

A zsírtalanítást követően acetonos kezelési és kicsapási kísérleteket végzünk annak vizsgálatára, hogy az oldószercsere milyen módon befolyásolja a mátrixból származó oldott komponensek elválasztását és az extraktumok jellemzőit. Emellett különböző összetételű metanol/víz, illetve acetonitril/víz oldószerkeverékek alkalmazásával mátrixkioldási kísérleteket végzünk. Az eltérő polaritású extrakciós rendszerek lehetőséget biztosítanak arra, hogy a mátrix különböző komponenscsoportjainak oldatba vitele és az extrakciós körülmények hatása összehasonlítható legyen.

A mintaelőkészítési vizsgálatok során előállított extraktumokat UV detektálás mellett nagyhatékonyságú folyadékkromatográfiás (HPLC-UV), valamint vezetőképességi detektálás mellett anioncserés ionkromatográfiával (AEXC) követjük nyomon. A kromatográfiás mérések elsődleges célja az extraktumok profiljának és a mintaelőkészítési lépések hatására bekövetkező változásainak feltérképezése, nem pedig az egyes komponensek pontos azonosítása és mennyiségi meghatározása. A különböző extrakciós és zsírtalanítási eljárásokkal kapott kromatogramok összehasonlítása révén vizsgálható, hogy az egyes mintaelőkészítési lépések milyen mértékben változtatják meg a vizsgált mátrix kromatográfiás karakterét.

A munka eredményei hozzájárulhatnak különböző mogyorófélék sokkomponensű analitikai vizsgálatához alkalmazható, reprodukálható mintaelőkészítési stratégia kialakításához, valamint a HPLC-UV és ionkromatográfiás profilozás együttes alkalmazhatóságának értékeléséhez.

Köszönetnyilvánítás: A kutatás a KKV Fókuszterületi Innovációs Program program keretében, a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Alapból biztosított támogatással, a 2024-1.1.1-KKV_FÓKUSZ-2024-00082 számú pályázat finanszírozásával valósult meg.

P-07 | Molekulavándorlás és sávszélesedés nyomásszabályozott folyadékkromatográfiában

Lukács Diána, Órai Gergő, Ulbert Olga, Horváth Krisztián

Pannon Egyetem, Természettudományi Központ, Veszprém

Folyadékkromatográfiában a nyomás az adszorpciós egyensúlyt és ezen keresztül az elválasztandó molekulák retencióját is befolyásolja [1]. Az oszlop menti nyomáskülönbség a molekulák vándorlását és a csúcsalakot is módosíthatja, ami megfelelő nyomásszabályozással kombinálva az elválasztási hatékonyság növelésére is kihasználható [2]. Munkánkban e hatásokat nyomásfüggő retencióval kiegészített egyensúlyi-diszperziós modellel vizsgáljuk, amelyet a Martin–Synge-algoritmussal, Pythonban oldunk meg. Állandó, lineáris és nemlineáris nyomásprofilok hatását elemezzük a retenciós időre, a csúcsszélességre, az elméletitányér-számra és a felbontásra. Vizsgáljuk a molekulák oszlopon belüli vándorlási pályáit és lokális sebességét is. A nyomás hatása az adszorpció moláris térfogatváltozásától függ, míg a térben változó retenció sávkompressziót és sávszélesedést egyaránt okozhat. A vándorlási pályák elemzése segíti e hatások és a kilépő csúcsalak kapcsolatának értelmezését, nyomásszabályozott elválasztások optimálását.

Irodalom

[1] M. Martin, G. Guiochon: Effects of high pressure in liquid chromatography. Journal of Chromatography A, 1090 (2005) 16–38. DOI: 10.1016/j.chroma.2005.06.005.

[2] S. Fekete, M. A. Lauber: Theoretical study on solute migration and band broadening occurring in pressure-enhanced liquid chromatography. Journal of Chromatography A, 1692 (2023) 463872. DOI: 10.1016/j.chroma.2023.463872.

P-08 | Ionfolyadék-alapú kapilláris elektroforetikus módszer kidolgozása anyatej- oligoszacharidok elválasztására

Makszin Lilla, Madarászné Horváth Ibolya, Páger Csilla

Bioanalitikai Intézet, Általános Orvostudományi Kar, Pécsi Tudományegyetem, Pécs

Az anyatej-oligoszacharidok (human milk oligosaccharide, HMO) az anyatej biológiailag aktív összetevői, amelyek prebiotikus, immunmoduláló és a kórokozók megtapadását gátló hatásuk révén jelentős szerepet töltenek be a csecsemők egészséges fejlődésében. Kutatásunk célja olyan ionfolyadék-alapú kapilláris elektroforetikus módszer fejlesztése, amely alkalmas natív HMO-k, köztük a 2′-fukozillaktóz (2′FL), a 3-fukozillaktóz (3′FL), a lakto-N-tetraóz (LNT), a lakto-N-neotetraóz (LNnT), a 3′-szialillaktóz (3′SL) és a 6′-szialillaktóz (6′SL) derivatizálás nélküli vizsgálatára. A kapilláris elektroforézis kis minta- és reagensigénye, valamint nagy elválasztási hatékonysága miatt megfelelő alternatívát jelenthet az oligoszacharidok vizsgálatára. Az alkalmazott 1-etil-3-metilimidazolium-tetrafluoroborát (1E-3MI-TFB) ionfolyadék az indirekt UV-detektáláshoz szükséges háttérelnyelés biztosítása mellett az elektroozmotikus áramlás és az analitok effektív elektroforetikus mobilitásának módosításán keresztül (az oligoszacharidokkal való kölcsönhatások miatt) az elválasztás szelektivitását is befolyásolhatja. A módszerfejlesztés során vizsgáltuk a háttérelektrolit összetételének és pHjának, az ionfolyadék koncentrációjának, a metanol jelenlétének, valamint az alkalmazott feszültségnek és hőmérsékletnek a HMO-k migrációs idejére, csúcsalakjára és elektroforetikus elválasztására gyakorolt hatását. Az vizsgált mérési körülmények lehetővé tették a vizsgált HMO-k derivatizálás nélküli detektálását és elektroforetikus vizsgálatát. A módszer további optimalizálást és validálást követően alkalmas lehet csecsemőtápszerek oligoszacharidösszetételének vizsgálatára és az egyes komponensek mennyiségi meghatározására.

Köszönetnyilvánítás

A munkát a *Bolyai János Kutatási Ösztöndíj (BO/00313/25)* és a *Pécsi Tudományegyetem Kutatási Alap Pályázat (003_2026_PTE_RK/1)* támogatta.

P-09 | Szerkezet–retenció–termodinamika összefüggések királis HPLC-elválasztásokban

Németi Gábor, Péter Antal, Ilisz István

Szegedi Tudományegyetem, Gyógyszeranalitikai Intézet, Szeged

Az élő szervezetekben számos királis vegyület található, amelyek enantiomerei eltérő biológiai és farmakológiai hatást fejthetnek ki. Ezért a királis gyógyszerhatóanyagok vizsgálata, a tiszta enantiomerek előállítása, valamint a racém elegyek enantioszelektív elválasztása kiemelt jelentőségű. A nagyhatékonyságú folyadékkromatográfiában erre széles körben alkalmaznak királis állófázisokat, amelyek közül a poliszacharid-alapú és cinkóna alkaloid-alapú királis szelektorokat tartalmazó állófázisok a legelterjedtebbek közé tartoznak. A szilikagél hordozóhoz kovalensen rögzített, „multimodális" állófázisok különösen sokoldalúan alkalmazhatók. A hagyományos normál fázisú módszerek mellett a „zöldebb" oldószereket alkalmazó fordított fázisú és poláris-szerves, valamint poláris-ionos kromatográfiás módok is hatékony alternatívát kínálnak.

A vizsgált királis vegyületek biológiai és gyógyszerészeti jelentősége miatt enantiomereik hatékony elválasztása és jellemzése fontos lépés a gyógyszerfejlesztési folyamatok során. Munkánk során az enantiomerek elválasztását immobilizált típusú királis állófázisokon tanulmányoztuk. Vizsgáltuk a mozgófázis összetételének, valamint a hőmérséklet változtatásának hatását az elválasztásra. Minden esetben meghatároztuk az enantiomerek elúciós sorrendjét. Tanulmányoztuk továbbá a szerkezeti jellemzők, retenciós tulajdonságok és a termodinamikai paraméterek közötti összefüggéseket.

Köszönetnyilvánítás:

A TKP2021-EGA-32 számú projekt a Kulturális és Innovációs Minisztérium Nemzeti Kutatási Fejlesztési és Innovációs Alapból nyújtott támogatásával, a TKP2021-EGA pályázati program finanszírozásában valósult meg.

P-10 | Modern kísérlettervezési módszerek királis molekulák preparatív folyadékkromatográfiás elválasztására

Lévai Sándor

Richter Gedeon Nyrt. Budapest

A királis vegyületek enantiomer szelektív elválasztása a gyógyszeriparban fontos feladat, hiszen az enantiomerk biológiai aktivitása, toxicitása és farmakokinetikai tulajdonságai gyakran eltérhetnek egymástól. A nagyteljesítményű folyadékkromatográfia (HPLC) fontos technika erre a célra, különösen poliszacharid alapú királis állófázisok alkalmazásával. A kromatográfiás módszerek fejlesztése azonban nem egyszerű feladat, mivel számos tényező, így például a mozgó fázis összetétele, a savas, bázikus módosítók mennyisége, aránya, a hőmérséklet, a folyadékáram összetett módon befolyásolja a retenciós időt és a felbontást. Az eluns sokszor három, vagy négy komponensű is lehet, ami bonyolult összetételek kialakulásához vezet.

A hagyományos egyváltozós módszerfejlesztési megközelítés idő és anyagigényes, valamint sok esetben nem tárja fel a tényezők közötti kölcsönhatásokat. A keverékterv (mixtrure design) korszerű, gyors, pontos matematikai leírást adó módszer a probléma megoldására. A keveréktervek jellemzője, hogy az eluens alkotók koncentrációjának összege 1, természetesen az összetevők századrészben számolva. Az így kapott összetételben mindig van egy olyan érték, ami a többitől nem független. Ennek kezelésére a Scheffé-féle, 1958-ban közölt, líneáris és kvadratikus leírást kínáló modelleket használhatjuk a kísérletek matematikai jelemzésére. A későbbiek során köbös és speciális köbös modellek is megalkotásra kerültek. Lehetőségünk van olyan kísérleti terv (DoE) felállítására is, amikor folyamat változókkal lehet kombinálni a keveréktervet. Ez azt jelenti például, hogy készintű faktortervvel generált hőmérsékelt és folyadékáram változókat csatolhatunk be a tervbe. Természetesen ez a megoldás növeli a szükséges mérések számát. Alapesetben a keverékterv a teljes koncentráció tartományt átfogja, de a királis vegyületek elválasztásakor az eluens összetétel erősen korlátos, ami azt jelenti, hogy az eluens komponenseinek van meghatározott alsó és felső koncentráció értéke. Ekkor nem szimplex-centroid, hanem szabálytalan hiperpoliéder kísérleti tartományt kapunk.

A tervezési folyamat az ingyenesen hozzáférhető R project-tel (R Project for Statistical Computing) a kezelhető a legrugalmassabban. Több mint 5000 csomag érhető el és telepíthető a különböző célok megvalósításához. A keveréktervek felállításához és elemzéséhez többek közt a mixexp, az AlgDesign, az Rcmdr és az RcmdrPlugin.DOE csomagok használhatók. Klasszikus módon a mixexp csomagban található függvényekkel hozzuk létre a kisérleti beállításokat, de kombinatív módon a latin hypercube design (LHS) megközelítés is alkalmazható.

A kísérletek elvégzése után a keverékterv matematikai elemzésével olyan eluens összetételek megtalálása lehetséges, ami maximalizálja az enantiomerek közötti

felbontás mértékét, így nagyobb preparatív terhelés lehetséges és rövidebb elválasztási idő szükséges.

P-11 | Szuperkritkus Fluid kromatográfia alkalmazása királis elválasztásokra

Prechl Anita, Lévai Sándor, Komáromi Bonifác, Bocskay Borbála

Richter Gedeon Nyrt., Budapest

A gyógyszeripar számos kiemelkedően sikeres készítménye tiszta sztereoizomereket tartalmaz, ezért egyre nagyobb igény mutatkozik az enantiomerek hatékony elválasztására a biológiai vizsgálatok támogatása érdekében. A királis vegyületek elválasztására alkalmas kromatográfiás módszerek fejlesztése jellemzően empirikus folyamat, amely során számos királis állófázis vizsgálata szükséges. A szuperkritikus fluidkromatográfia (SFC) szuper- vagy szubkritikus fluidumot alkalmaz mozgófázisként, amely alacsonyabb viszkozitásának és nagyobb di úziós együtthatójának köszönhetően a folyadékkromatográfiához (HPLC) képest gyorsabb elválasztásokat tesz lehetővé.

A poszter bemutatja az alkalmazott analitikai szűrési technológiát, amely lehetővé teszi egy racém minta két órán belüli vizsgálatát hat különböző királis állófázison.

A vizsgált minták mintegy 80%-ánál az analitikai módszer preparatív méretre történő átültetése kizárólag kinetikai paraméterek módosításával megvalósítható, például a gradiens módszer lineáris módszerré történő átszámításával vagy eltérő lineáris mozgófázis-sebesség alkalmazásával. Bizonyos esetekben további fejlesztésekre van szükség a preparatív méretben is megfelelő felbontás eléréséhez. Ilyenkor nemcsak a kinetikai, hanem a termodinamikai paraméterek módosítása is szükséges lehet, például eltérő szerves modifikátorok vagy speciális adalékanyagok alkalmazásával. A preparatív elválasztás Shimadzu SFC készüléken, LotusStream szeparátor alkalmazásával történik.

Az elmúlt években több száz anyag királis elválasztását sikerült megoldani az SFC screen alkalmazásával, illetve az eredményeit a királis HPLC módszerek fejlesztéséhez is felhasználjuk.

P-12 | Az adenozin-nukleotidok mennyiségi meghatározása prokariótákban- kihívások az LC-MS analízis során

Guba Andrea[1,2], Jain Mansi[1], Kalló Gergő[1,2], Csősz Éva[1,2]

[1] *Debreceni Egyetem, Általános Orvostudományi Kar, Biokémiai és Molekuláris Biológiai Intézet, Proteomika Szolgáltató Laboratórium, Debrecen*
[2] *Debreceni Egyetem, Általános Orvostudományi Kar, Biokémiai és Molekuláris Biológiai Intézet, Metabolomikai Kutatócsoport, Debrecen*

Kulcsszavak: adenozin nukleotidok, UPLC-MS, prokarióta

Az adenozin-nukleotidok minden élő sejtben megtalálható metabolitok, amelyek kulcsfontosságú szerepet játszanak az energia-homeosztázisban, emellett befolyásolják az intercelluláris kommunikációt és a gyulladásos folyamatokat is. Bár az adenozin-trifoszfát (ATP) a sejtek univerzális energiahordozó molekulája, az ATP, az adenozin-difoszfát (ADP) és az adenozin-monofoszfát (AMP) egymáshoz viszonyított aránya fontos indikátora a sejtek aktuális energiaállapotának és metabolikus kapacitásának. Ezen metabolitok pontos és megbízható mennyiségi meghatározása elengedhetetlen ahhoz, hogy jobban megértsük az AN-egyensúly felborulásának sejtfunkciókra gyakorolt hatásait.

A kutatás során optimalizáltunk egy ATP, ADP és AMP molekulák szimultán vizsgálatára alkalmazható gyors LC-MS módszert. Az analíziseket Acquity H-Class UPLC-vel (Waters) kapcsolt 5500 QTRAP (Sciex) tömegspektrometriás rendszeren végeztük, 3 perces gradiens elúciós módszert alkalmazva. A célvegyületeket Selected Reaction Monitoring (SRM) üzemmódban detektáltuk. A módszerfejlesztés során több kromatográfiás álló fázist is teszteltünk a megfelelő elválasztás és csúcsalak eléréséhez. A módszer optimalizálása után *S. acidocaldarius*, és *E. coli* sejtlizátum mintákban vizsgáltuk meg az adenozin-nukleotidok mennyiségét.

Az eredmények alapján az adenozin-nukleotidok kimutathatók és kvantitálhatók voltak a prokarióta sejtlizátumokban. Az ATP-ADP-AMP aránya *S. acidocaldarius*, és *E. coli* sejtekben különbséget mutatott.

Összességében megállapítható, hogy a módszer jól alkalmazható az adenozin-nukleotidok mennyiségi meghatározására és új lehetőségeket kínál az adenozin-nukleotidok turnover sejtfunkciókban betöltött szerepének mélyebb megértéséhez.

Köszönetnyilvánítás

A kutatás a NKFIH 2020-2.1.1-ED-2023-00269 és a DC10 PROHITS-pályázatok támogatásával valósult meg.

P-13 | HPLC-MS/MS determination of DINCH plasticizer metabolites in breast milk

Góra Róbert, Górová Renáta, Jurdáková Helena

Department of Analytical Chemistry, Faculty of Natural Sciences, Comenius University in Bratislava, Bratislava, Slovak Republic

Keywords: oxo-MINCH, hydroxy-MINCH, breast milk, pretreatment efficiency, HPLC-MS/MS

Human biomonitoring is the best tool for identifying, controlling and preventing exposure of the population to environmental chemical pollutants [1]. Di(isononyl) cyclohexane-1,2-dicarboxylate (DINCH) gradually replaces phthalates used as plasticizers in many consumer products, especially in food packaging, children's toys and medical devices due to its more favorable toxicological profile [2]. However, as the DINCH production and usage have been rapidly increased, the rate of exposure is increased accordingly, so biomonitoring of exposure is important mainly in sensitive population cohorts such as children in early life [3]. By breastfeeding, the mother can transfer to child potentially toxic chemicals to which she has previously been exposed. As biomarkers of exposure to DINCH, mainly two oxidized metabolites, hydroxy- (OH-MINCH) and carboxy- (cx-MINCH) cyclohexane-1,2-dicarboxylic acid monoesters are used. The aim of this work was to study the breast milk sample pretreatment prior to HPLC-MS/MS determination of these two metabolites.

We examined aqueous fraction of milk obtained after centrifugation, and extracts to ethylacetate and mixture of ethylacetate and hexane. Pretreatment procedures were assessed for overall pretreatment efficiency based on the recovery of cx-MINCH and OH-MINCH from the matrix and on the matrix effects in the ionization source of mass spectrometer. Online SPE-HPLC-MS/MS analyses were performed using C-18 stationary phase and selective mass transitions were monitored in negative mode for each analyte and corresponding isotopically labeled standards by triple quadrupole MS.

Pretreatment efficiency obtained for aqueous milk phase and ethylacetate extracts were very similar at the level of 50 %. Addition of hexane into the extraction solution resulted in the recovery decrease by half. Extraction with examined organic solvents did not bring any improvement of overall pretreatment efficiency. On the basis of HPLC-MS/MS chromatograms of aqueous fraction of milk samples, we estimated the limits of quantification as signal-to-noise ratio 10, for cx-MINCH 0.03 µg/l and for OH-MINCH 0.12 µg/l.

Analysis of the aqueous fraction of breast milk after deconjugation and centrifugation was found out as the most proper for the determination of oxidized metabolites of DINCH, as it is environmentally friendly, cheaper, less laborious and time-consuming, but with comparable limits of quantification as for ethylacetate extraction.

Acknowledgements

This work was supported by the Slovak Research and Development Agency under contract No. APVV-20-0462 and by the Slovak Grant Agency under contract No. VEGA 1/0690/26.

References

[1] Angerer J., Ewers U., Wilhelm M., (2007). Int. J. Hyg. Environ. - Health, 210, 201.
[2] Jurdáková H., Górová R., (2021). Zdravotnícke listy, 9(4), 34.
[3] Massart F., Gherarducci G., Marchi B., Saggese S., (2008). Biomarker Insights, 3, 159.

P-14 | Az ütközési energia hatása a mélytanuláson alapuló de novo peptidszekvenáló algoritmusok teljesítményére

Pálfi Fanni Klaudia, Révész Ágnes, Drahos László

HUN-REN Természettudományi Kutatóközpont, MS Proteomika Kutatócsoport, Budapest

A proteomikai vizsgálatok során számos olyan peptid szekvenciája lehet ismeretlen, amely nem szerepel a rendelkezésre álló fehérje- vagy peptidadatbázisokban. Ilyen esetekben a hagyományos, adatbázis-alapú azonosítás nem képes a szekvencia meghatározására, ezért különösen fontosak az adatbázis-független *de novo* szekvenálási módszerek. Ezek a tandem tömegspektrumok fragmentációs mintázatából közvetlenül próbálják rekonstruálni a peptidszekvenciát, így lehetőséget teremtenek ismeretlen vagy korábban nem annotált peptidek azonosítására. A *de novo* szekvenálás pontosságát azonban alapvetően meghatározza a rendelkezésre álló spektrális információ, amelyre az ütközési energia is jelentős hatással van. A mélytanuláson alapuló algoritmusok fejlődésével több, eltérő architektúrát alkalmazó módszer vált elérhetővé, azonban kevéssé ismert, hogy ezek teljesítménye hogyan változik az ütközési energia függvényében, illetve milyen kapcsolat áll fenn a spektrum, a peptid tulajdonságai és a szekvenálási pontosság között. Munkánkban ezért három mélytanuláson alapuló *de novo* szekvenáló algoritmus, a PrimeNovo, a Casanovo és az InstaNovo teljesítményét vizsgáltuk különböző ütközési energiák mellett, tripszines HeLa-emésztmény Bruker QTOF- és Thermo Orbitrap-rendszeren felvett nanoUHPLC–MS/MS-adatain. A prediktált szekvenciákat Byonic- és FragPipe-kereséssel kapott referenciaszekvenciákhoz hasonlítottuk. Célunk volt az optimális energiatartomány meghatározása, valamint annak vizsgálata, hogy az adatbázis-alapú azonosításhoz optimális energia megegyezik-e a *de novo* szekvenáláshoz szükséges beállítással. Emellett elemeztük a peptid szekvenciahossza és hidrofobicitása, valamint a spektrális jellemzők kapcsolatát a *de novo* predikció pontosságával. Elemzés alapján a rövid, kevésbé hidrofób peptidek szekvenálása érzékenyebb a beállításokra, míg a hosszú hidrofób peptidek jelentősen kisebb energiafüggést mutatnak, széles energiatartományban jól szekvenálhatók. A spektrumok futások közötti illesztéséhez retenciósidő-korrekciót alkalmaztunk, így biztosítva, hogy minden energián azonos peptidkészleten értékeljük modellek teljesítményét. Eredményeink alapján a *de novo* szekvenálás optimális beállításai 2-4 eV-tal/ 2-5 NCE%-kal nagyobb ütközési energiát igényelnek az adatbázis-alapú azonosítás optimális beállításaihoz képest. A megfelelő ütközési energia megválasztása javíthatja a *de novo* szekvenálás megbízhatóságát. A vizsgált modellek közül a PrimeNovo széles energiatartományban mutatott magas átlagos szekvencialefedettséget, ami a műszeres körülmények változékonyságával szemben robusztus *de novo* azonosítást tesz lehetővé. Eredményeink rámutatnak arra, hogy a *de novo* peptidszekvenálás pontosságának maximalizálásához az adatgyűjtési paramétereket – például ütközési energát – az adatbázis-kereséstől eltérően kell beállítani. Ez gyakorlati következménnyel jár minden olyan proteomikai kísérletterv számára, amelyben *de novo* értékelés is szerepel.

P-15 | Miniatürizált méretkizárásos kromatográfiás eljárások fejlesztése és alkalmazása glikánok tisztítására

Pap Martin, Rachma Dessidianti, Németh Júlia, Turiák Lilla,
Virág Dávid

MTA-TTK Lendület Glikán Biomarker Kutatócsoport, Szerves Kémiai Intézet, HUN-REN Természettudományi Kutatóközpont, Budapest

A méretkizárásos kromatográfia a fehérjék tisztításának és frakcionálásának széles körben alkalmazott módszere, glikomikai célú alkalmazása azonban kevésbé elterjedt. Kutatásunk célja különböző glikánminták, elsősorban *N*-glikánok és glükózaminoglikán (GAG) diszacharidok méretkizárásos kromatográfiás viselkedésének jellemzése különböző poliakrilamid (Bio-Gel P-2, P-4, P-6) és dextrán (Sephadex G-15, G-25) alapú gélek alkalmazásával. További célkitűzésünk olyan miniatürizált méretkizárásos eszközök (centrifugálható minikolonnák és pipettahegyek) kialakítása, amelyek lehetővé teszik a glikomikai minták kis térfogatban történő, nagy áteresztőképességű és gyors tisztítását.

A vizsgálatokhoz glikoprotein-standardokból enzimatikus úton felszabadított *N*-glikánokat, valamint különböző mértékben szulfatált kondroitin-szulfát (CS) diszacharid-standardokat alkalmaztunk. A mintákat különböző gélek alkalmazásával, nagyhatékonyságú folyadékkromatográfiás módszerrel választottuk el, amely során a kolonna kizárási térfogatával (V_0) eluálódó frakciót gyűjtöttük. Ezt követően modellanyagok alkalmazásával meghatároztuk az 500, 200 és 80 µl géltérfogatú miniatürizált eszközök esetén a 85%-os sómentesítéshez szükséges elúciós térfogatokat, majd a mintákat ezen térfogatok alkalmazásával eluáltuk az eszközökről. Az egyes glikánok mennyiségét hidrofil kölcsönhatású kromatográfiával (HILIC) kapcsolt tömegspektrometria alkalmazásával határoztuk meg.

Eredményeink rávilágítanak arra, hogy mind a CS-diszacharidok, mind az *N*-glikánok a kolonna kizárási térfogatával (V_0) eluálódtak a vizsgált gélek esetében, ezért a módszer alkalmas a minták kis molekulatömegű szennyezőanyagoktól való megtisztítására, illetve sómentesítésére. Visszanyerés tekintetében a GAG-diszacharidok esetén a P-6 (80%), míg az *N*-glikánok esetén a G-15 (81%) gél bizonyult a leghatékonyabbnak. A G-15 gél alkalmazása esetén továbbá nem volt megfigyelhető szignifikáns különbség a sziálsavtartalmú és a nem szializált, oligomannóz típusú glikánok visszanyerése között ($p < 0,05$). Ezenfelül *N*-glikomikai minták esetén a miniatürizálás mértékének növelésével nőtt a visszanyerés (79%, 81%, 83%). A szénhidrátminták tisztítására gyakran alkalmazott módszerekkel, mint különböző HILIC alapuló eljárásokkal, a porózus grafitizált szén alapú szilárd fázisú extrakcióval, valamint membránszűrésen alapuló módszerekkel összehasonlítva a gélkromatográfiás eljárások mind a visszanyerés, mind a torzítatlanság szempontjából kedvezőbb teljesítményt mutattak. A kifejlesztett eljárásokat ezt követően sikerrel alkalmaztuk humán hörgőhám-eredetű, valamint különböző tüdődaganatos sejtvonalak glikomikai feltérképezését szolgáló munkafolyamat részeként.

A kutatás a Magyar Tudományos Akadémia Lendület Programjának (LP2023-19), valamint az Európai Bizottság IMProGlyco (101186774) projektjének támogatásával valósult meg.

P-16 | Kihívások az injekciós gyógyszerkészítmények in-use módszervalidálásában

Varga Balázs Hoangnam, Fedor Diána Szimonetta, Suskó Dávid Mihály, Csatári Enikő

Richter Gedeon Nyrt., Budapest

Az ICH Q1A(R2) irányelv előírásainak megfelelően az in-use stabilitási vizsgálatokhoz validált analitikai módszerek alkalmazása szükséges. A hígítatlan készítményre rendelkezésre álló validált módszerek az in-use minták eltérő koncentrációja és mátrixa miatt nem voltak közvetlenül alkalmazhatók, ezért azok módosítása vált szükségessé. Az eredeti és a módosított módszerek közötti magas fokú hasonlóság lehetővé tette a már igazolt validálási teljesítményjellemzők részleges átvételét, ezáltal csökkentve a validálási ráfordítást és gyorsítva a fejlesztési folyamatot.

A módszerek validálása sorábn több kihívás is jelentkezett. A poszter célja ezen kihívások, valamint a kezelésükre kidolgozott megoldások és a levont tanulságok bemutatása.

P-17 | Impact of column hardware systems on (U)HPLC column performance

Heiko Behr[1], Jason Anspach[2], Brady Drennan[2], Gareth Friedlander[2], Roxana Eggleston-Rangel[2], Rajashree Chakravarti[2]

[1] *Phenomenex LTD, Aschaffenburg, Germany*
[2] *Phenomenex, Inc., Torrance, United States*

Az (U)HPLC oszlopok fejlesztése során hagyományosan az állófázis kémiája, a szemcseméret és a pórusszerkezet áll a figyelem középpontjában, miközben maga az oszlopház lényegesen kevesebb figyelmet kap. Pedig az oszlopház kialakítása az oszlop élettartamára, az érzékenységre és az analitok nemspecifikus adszorpciójára is jelentős hatással lehet.

A bemutatott vizsgálatokban az új Endrix oszlopház alkalmazásával biológiai mátrix ismételt injektálása során, a hagyományos kivitelhez képest, átlagosan mintegy kétszeres oszlopélettartamot értek el. A különböző szerkezeti anyagok és felületkezelések összehasonlítása emellett jelentős, minta- és mozgófázis-függő különbségeket mutatott a nemspecifikus adszorpcióban. Az eredmények arra hívják fel a figyelmet, hogy az optimális kromatográfiás teljesítményhez nemcsak a megfelelő állófázis, hanem a megfelelő oszlopház megválasztása is fontos.

P-18 | Ciklodextrin-komplexek stabilitásának meghatározása, a citalopram példáján

Ujj Dóra[1], Petr Kasal[2], Fejős Ida[3], Béni Szabolcs[4], Kardos József[5], Benkovics Gábor[1], Bálint Erika[1], Mátravölgyi Béla[1]

[1] *Szerves Kémia és Technológia Tanszék, Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar, Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Budapest*
[2] *Department of Organic Chemistry, Faculty of Science, Charles UniversityPrague, Czech Republic*
[3] *Gyógyszerésztudományi Kar, Farmakognóziai Intézet, Semmelweis Egyetem, Budapest*
[4] *Analitikai Kémiai Tanszék, Kémiai Intézet, Eötvös Loránd Tudományegyetem, Budapest*
[5] *Biokémiai Tanszék, Eötvös Loránd Tudományegyetem, Budapest*

Kutatásunk során két sugammadex-analóg ciklodextrin, a subetadex (SBX) és a mono-subetadex (monoSBX) komplexképző tulajdonságainak vizsgálatára, valamint a natív β-ciklodextrinnel (β-CD) való összehasonlítására helyeztük a hangsúlyt. A vizsgált CD-k izomertiszták, a primer oldalon karboxi-tioéter-csoportokkal teljesen, illetve részlegesen szubsztituáltak. Ezen CD-k előnye, hogy szerkezetük és tulajdonságaik pontosabban meghatározható, mint a különböző mértékben és helyzetben, tehát a véletlenszerűen szubsztituált változatoké.

A komplexképződési tulajdonságokat pH 7,4-en vizsgáltuk, modellvegyületként citalopramot (CIT) alkalmazva, ami egy, a szelektív szerotoninvisszavétel-gátlók (SSRI-k) közé tartozó antidepresszáns. A kialakuló komplexek stabilitási állandóit különböző módszerekkel határoztuk meg: fázisoldhatósági vizsgálat, Hummel–Dreyer módszer (HD), affinitás kapilláris elektroforézis (ACE) és izotermális titrációs kalorimetria (ITC). A kutatás célja az SBX, illetve a monoSBX és a CIT között kialakuló komplexek részletesebb megértése, valamint a különböző módszerekkel meghatározott stabilitási állandók összehasonlítása volt.

Az eredmények alapján elmondható, hogy az ACE és az ITC módszerek bizonyult a legmegbízhatóbbnak a CD–vendégmolekula komplexek stabilitási állandóinak meghatározására, azonban a HD módszer jó alternatívája lehet ezeknek a kevésbé elterjedt technikáknak. A HD módszer előnye, hogy anyaghatékony és csupán egy HPLC szükséges a méréshez.

Az 1D és 2D NMR-vizsgálatok pedig megerősítették az alkalmazott módszerekkel kapott eredményeket és betekintést engedtek a kialakult CD-CIT komplexek háromdimenziós szerkezetébe.