Szerkezeti Biológiai és Molekuláris Felismerési Kutatócsoport

http://www.structbiol.unideb.hu/

Dr. Batta Gyula, egyetemi tanár

Dr. Bényei Attila, egyetemi docens

Dr. Gyémánt Gyöngyi, egyetemi docens

Dr. Barna Teréz, egyetemi adjunktus

Dr. Czajlik András, tudományos munkatárs

Izsépi László, PhD. hallgató

Projektek:

1**. Fehérjék, peptidek, glikopeptidek szerkezete és molekuláris dinamikája**

Az antifungális fehérjékkel kapcsolatos hatás/szerkezet kutatásainkat kibővítettük. Dr. Florentine Marx (Innsbruck), Dr. Peter Crowley (Galway, Írország), Dr. Galgóczy László és Dr. Váradi Györgyi (Szeged), Dr. Gáspári Zoltán (Budapest, PPKE) csoportjaival együttműködve összehasonlítjuk a PAF, NFAP, NFAP2, PAFB, PAFC fehérjék és variánsaik szerkezetét, dinamikáját és működésmódját. Mintegy 10 fehérje szerkezetét deponáltuk eddig a pdb adatbázisba. TÁMOP/OTKA/GINOP forrásból nagyérzékenységű ITC-200 és automata DSC mikrokalorimétereket szereztünk be, amelyek jól kiegészítik az NMR telítés átvitel technikákat a fehérje-ligandum interakciós és a letekeredési kísérletekben. A szegedi partnereink által kémiai szintézissel előállított fehérjékről bizonyítottuk, hogy szerkezetük azonos a natív változatokkal és az antifungális hatásuk is azonos. A fehérjék teljes 1H/13C/15N NMR (https://debnmr.unideb.hu/) jellemzését közöljük és a rendkívül stressztűrő diszulfid fehérjék hideg/meleg és kémiai (DMSO) kitekeredését értelmezzük. Az antimikrobiális fehérjék és a fonalas gombák interakcióit is vizsgáljuk. A Gyógyszerészi Kémiai Tanszékkel kooperálva több új, félszintetikus antibiotikumról közöltünk eredményeket. Az antivirális hatású glikopeptid antibiotikum aglikonok és származékok hatásmechanizmusát elméleti számításokkal és NMR NOE vizsgálatokkal értelmezzük. Dr. Barna Teréz PhD hallgatóival közös munkában a β-D-xilozidáz és mannoszintáz mutáns enzimek hatásmechanizmusát illetve a keletkező manno-oligoszacharid termékeket vizsgáltuk.

2. **Önszerveződő rendszerek**

Prof. Herczegh Pál közreműködésével előállított új, guanozin-tartalmú, G4 típusú molekuláris önszerveződésre képes vegyületek szerkezetét vizsgáltuk (COST MP0802 projekt (http://www.g4net.org/home.html). Az ilyen típusú vegyületek alkalmasak lehetnek molekuláris elektronikus eszközök előállítására, de farmakológiailag aktív vegyületek is lehetnek közük telomeráz inhibitor aktivitással. Dr. Kovács Lajossal (Szeged) együttműködve, a koffeinhez hasonló 3-metilxantinról bebizonyítottuk hogy a guaninhoz hasonlóan, képes kvadruplex szerkezet kialakítására. Újabban a glikopeptid-sejtfal-analóg modell rendszerek önszerveződésére is találtunk példákat.

3. NMR módszertani fejlesztések

Dr. E. Kövér Katalinnal régi hagyománya van a metodikai fejlesztéseknek, amit az új 700 MHz-es spektrométer üzembehelyezése különösen aktuálissá tesz. Ezek közt említhető a pontosabb proton-proton távolság mérése új ROESY módszerrel és a különféle telítés átviteli technikák (STD) bevezetése

fehérje-ligandum interakciók vizsgálatára, továbbá a fehérjék belső dinamikájának vizsgálatára alkalmas relaxációs technikák alkalmzása.