



Szerkezeti Biológiai, Molekuláris Felismerés és Kölcsönhatás Kutatócsoport

Dr. E. Kövér Katalin a kutatócsoport vezetője

Dr. Batta Gyula, egyetemi tanár

Dr. Fehér Krisztina, tudományos főmunkatárs

Terdikné Dr. Csávás Magdolna, tudományos főmunkatárs

Dr. Szilágyi László, emeritus professzor

Tóthné Dr. Illyés Tünde Zita, egyetemi adjunktus

Dr. Timári István, egyetemi adjunktus

Dr. Barna Teréz, egyetemi adjunktus

Dr. Bege Miklós, tudományos segédmunkatárs

Nagy Tamás Milán, PhD hallgató

Raics Mária, PhD hallgató

Izsépi László, PhD hallgató

Balla Sára, technikus

Nagy Károlyné, technikus

A kutatócsoport kutatási fókuszterülete

A modern mágneses magrezonancia (**N**uclear **M**agnetic **R**esonance, **NMR**) spektroszkópia a molekulák oldatbeli szerkezetének, mozgási jellemzőinek és a molekuláris kölcsönhatásainak rendkívül hatékony kutatási eszköze. A molekuláris felismerésért felelős fehérje-ligandum kölcsönhatások atomi szintű vizsgálatán keresztül kiemelkedően fontos információkat nyújt a szerkezet-hatás összefüggések felderítéséhez és ezáltal új terápiás készítmények kifejlesztéséhez. Kutatócsoportunk nemzetközileg is jelentős eredményeket ért el olyan új NMR módszerek fejlesztése területén, amelyek az NMR paraméterek érzékeny meghatározását, valamint a molekuláris kölcsönhatások atomi szintű vizsgálatát teszik lehetővé.

Kutatási programunkban szerepel új NMR kísérleti metodikák kidolgozása a molekuláris kölcsönhatások szerkezeti és dinamikai jellemzőinek tanulmányozására; ligandumok kötődésért felelős szerkezeti egységeinek feltérképezésére, valamint a ligandumok kötőhelyekért való versengésének tanulmányozására és a kötődés specifikus illetve nem-specifikus jellegének eldöntésére. Kötődésvizsgálatok kiterjesztése membránhoz kötött, G-fehérjéhez kapcsolt receptorokra. Új, biológiailag aktív peptidek, fehérjék, szénhidrátok és származékaik, valamint

egyéb természetes illetve szintetikus eredetű molekulák oldatbeli szerkezetének és mozgási jellemzőinek NMR vizsgálata. A vizsgált vegyületek térszerkezete és biológiai hatása közti összefüggések elemzése. Gomba és vírusellenes minifehérjék (pl. PAF, NFAP2, PAFC) stabilitás-szerkezet-dinamika-hatás összefüggéseinek tanulmányozása. A Postsynaptic Density (PSD) fehérje hálózat (pl. GRIP1, Shank1, GKAP) NMR szerkezeti és dinamikai vizsgálatai. Különböző szénhidrát-mimetikumok lektin-kötődésének vizsgálata a szénhidrát-fehérje kölcsönhatások molekuláris mechanizmusának jobb megértése céljából. Heparin-analóg szénhidrát származékok kölcsönhatásának vizsgálata antitrombinnal többek közt NMR, ITC és CD mérésekkel. Antibakteriális és antivirális hatású módosított glikopeptid antibiotikumok szerkezetének és interakcióinak tanulmányozása. Protein foszfatáz inhibitorok és aktivátorok hatásmechanizmusának felderítése új, farmakológiai szempontból hatékonyabb molekulák tervezése céljából.

Aktuális kutatási témákról és eredményekről további információ az alábbi oldalon érhető el:

<https://debnmr.unideb.hu/>