|  |  |
| --- | --- |
| OLÁH TAMÁS ISTVÁN  fizikus BSc, 5. félév  Eötvös Loránd Tudományegyetem Természettudományi Kar |  |

Témavezető:

|  |
| --- |
| Smeller László  tanár, SE ÁOK |

Molekulaszerkezeti és dinamikai adatok rezgési spektrumokal való kapcsolatának analízise fehérjék esetén

Molekulaszerkezeti és -dinamikai adatok rezgési spektrumokkal való kapcsolatának analízise fehérjék esetén.

Készítette: Oláh Tamás István, Fizika Bsc. III.  
Témavezető: Dr. Smeller László  
Semmelweis Egyetem Biofizikai és Sugárbiológiai Intézet

A fehérjék működéséhez egyedi térszerkezet szükséges. A másodlagos szerkezeti elemeket az infravörös spektrumban az amid I sáv alapján azonosítják. Az amid I rezgések a leginkább konformáció-érzékenyek, mert a rezgési energiájuk nagy része a hidrogénhíd kötésben található C=O nyújtási módusból származik. Ennek az oxigénnek és a fehérjemolekula egy másik aminosavjának NH hidrogénje között jön létre a konformációt stabilizáló hidrogénhíd kötés.  
Munkám során ismert szerkezetű fehérjék koordinátaadataiból határoztam meg a hidrogénhíd kötésben résztvevő atomok kötési távolságait. Megvizsgáltam, hogy milyen kapcsolat áll fenn a fehérjék infravörös spektruma és különböző módszerekkel meghatározott fehérjeszerkezetek között, a helikális és lemezes másodlagos szerkezeti struktúrákra milyen a hidrogénkötés távolság és szög eloszlása. Elő lehet-e állítani a spektrumot az atomok koordinátáinak ismeretében? Ezenkívül a dihodrofolát reduktáz (DHFR) enzim molekuláris dinamikai szimulációval készített trajektóriájából, meghatároztam az amid I rezgési frekvenciákat Fourier transzformáció segítségével. A különböző módszerekkel meghatározott fehérjeszerkezetekben jól látható különbség van a C=O és O-N távolságok között, a módszertől függően. Mindegyik esetben a távolságok a megfelelő nagyságrendű tartományba esnek, azonban a szerkezeti adatok nem elég pontosak ahhoz, hogy a spektrumot kielégítő pontossággal előállíthassuk belőlük.