

Beszámoló a „Workshop on Structural Biophysics” rendezvényről

2021. december 5 és 10 között került megrendezésre Bordeauxban a „Workshop on Structural Biophysics”, amelyen az MKE CSMCS támogatásának köszönhetően részt vehettem. A rendezvényt a Francia Nemzeti tudományos kutatási központ szervezte (CNRS) az „European Institute of Chemistry and Biology” (IECB) Bordeaux-i intézetében.

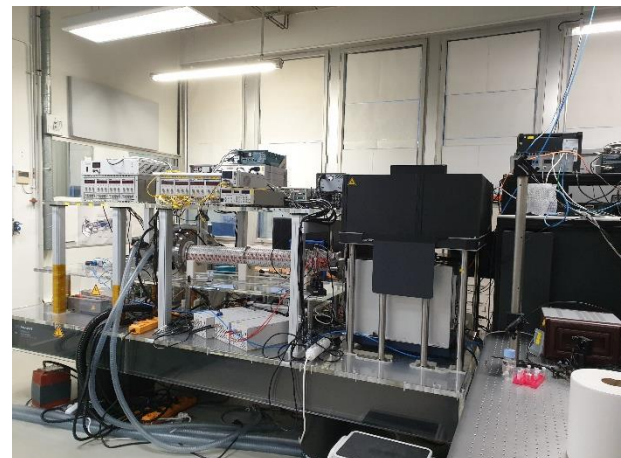


A workshop-on a röntgenkristallográfia, mikroszkópia (TEM, SEM, CRYO-EM, AFM), tömegspektrometria, molekulamodellezés, NMR és ESR spektroszkópia, valamint Infra és Raman spektroszkópia új eredményeiről, technikáiról hallgathattunk előadásokat a délelőtti szekciókban. Ezt követően a gyakorlatban is kipróbálhattuk a mérési módszereket, a mintaelőkészítési műveleteket, és az adott módszernél alkalmazható különböző technikákat. Az adatok kiértékelésébe is betekintést nyerhettünk.

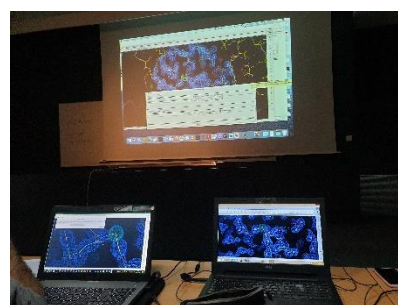
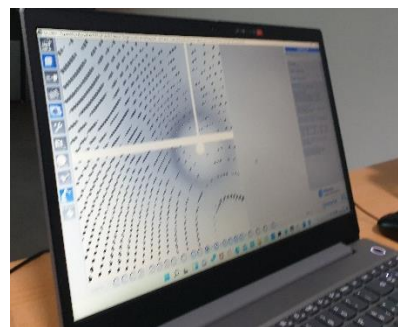
A Krio-elektronmikroszkópia az egyik legígéretesebb újszerű módszer fehérjék szerkezetének meghatározására. Ily módon akár a nem kikristályosítható membránfehérjék szerkezete is meghatározható natív körülmények közt. A kutatóintézetben egy Talos Arctica Cryo-TEM készülék használatát tanulhattuk meg a speciális mintaelőkészítési műveletekkel együtt. Ezzel a készülékkel akár $<3 \text{ \AA}$ felbontásban lehet fehérjeszerkezeteket meghatározni.



Megismerkedhettünk az MS-hez kapcsolható ionmobilitás spektrometriával, amely révén a lágyan ionizált (ESI-MS) molekulák nem csupán méretük, de alakjuk alapján is elkülöníthetők, így vizsgálható azok harmadlagos szerkezete is. Lehetőség van az ionizált molekulák UV-Vis abszorbancia spektrumát, valamint Cirkuláris Dikroizmus spektrumát *in-situ* vizsgálni az egyedileg tervezett készülékekben.



A makromolekulák modellezése hatalmas fejlődésen ment keresztül az elmúlt években. Nagy problémát jelentett, hogy teljes pontosságú „elhanyagolásmentes” *ab-initio* számítások csak néhány atomból álló molekulák esetén hathatók végre. A korábbi molekuladinamikai számítások „ball and stick” módon klasszikus mechanikai testekként kezelték az atomokat, míg az erőterekkel operáló programok (pl.: Gromos) akár egész aminosavakat is egy egységként kezelték, így a jelentős elhanyagolások gyakran pontatlan eredményt adtak az egyszerűbb rendszerek esetében is. A workshop részeként megismerkedhettünk a legújabb neurális hálózatokat használó Alpha Fold rendszerrel, amely képes elsődleges szerkezete alapján az eddigieknél jóval pontosabb negyedleges szerkezet jóslására, olcsóbban. Így számos korábbi röntgenkristallográfiás mérés kiértékelése is lehetségessé vált, ilyen adatkiértékeléseket is végeztünk a gyakorlat során.



Emellett a rendezvény poszter szekcióján megvitathattuk kutatási eredményeinket a többi résztvevővel. Poszteremen az *apo* cinkujj fehérje-Zn(II), *holo* cinkujj fehérje-DNS rendszerek tanulmányozását mutattam be, valamint ezek viselkedését toxikus fémionok jelenlétében. Ezen kutatás esetén a legtöbb mérés kvantitatív kiértékeléséhez már csak a képződő komplexek szerkezetének meghatározására lenne szükség. Miután számos hasznos javaslattal, észrevétellel gazdagodtam, ezeknek és a workshop-on tanult új technikáknak köszönhetően meggyőződésem, hogy a komplexek szerkezeti jellemzését is megvalósíthatjuk a jövőben.

