Önszerveződő nukleobázis rendszerek, peptidek, fehérjék számítógépes vizsgálata.   
Dr. Paragi Gábor  
MTA-SZTE Biomimetikus Rendszerek Kutatócsoport

Előadásomban az általam is használt számítógépes modellezési eljárásokról és a velük vizsgált rendszerekről szeretnék egy rövid áttekintést adni. A vizsgált rendszerek egy nagy csoportját adják a nukleinsav bázisokra vonatkozó elektronszerkezeti számítások. Itt kísérleti és elméleti csoportokkal együttműködve, természetes és mesterséges nukleobázisok egy speciális önszerveződő tulajdonságát az ú.n. kvadruplex képzését vizsgáltuk különböző esetekben. Egyrészt elméleti úton kimutattuk, hogy a guanin bázis esetén egy extra stabilitás van jelen ezekben a struktúrákban, majd megmutattuk, hogy ez az extra hatás miként befolyásolja a guanin molekula önszerveződését felszíni struktúrák esetében. Emellett új kvadruplex képződésre alkalmas mesterséges nukleobázisok tervezését segítettem elő sűrűségfunkcionál elméleti számításokkal és energiadekompozíció analízis alkalmazásával. További kooperációs együttműködésben, kvantumos vizsgálatokkal járulok hozzá ahhoz a módszerfejlesztési projekthez, melyben fehérje-ligand komplexek esetében próbáljuk meg előre jelezni a vizek hozzájárulását a kölcsönhatáshoz.

Az előadás második részében azokról a főként molekulamehanikai számításokról beszélnék, melyeket különböző biológiai rendszerek vizsgálatainál alkalmaztam. Homológia modellezés történt SQR enzimek esetében, és részt vettem új dokkolási eljárás kidolgozásában, mely lehetővé teszi egy célfehérje (pl. GPCR fehérje) dinamikai karakterének figyelembe vételét a target előkészítésében. További irányt képvisel az Alzheimer kutatásban központi szerepet játszó amiloid-β peptid és kis ligand molekulák kölcsönhatásának vizsgálata, ahol több különböző dokkolási eljárással, illetve „potential of mean force” módszerrel számoltuk a kötési energiát. Ezenfelül további együttműködések keretében több más receptor esetében (pl. EGFR, CFTR, NMDA) is folynak ligand-receptor kölcsönhatási vizsgálatok, illetve fehérje-fehérje kölcsönhatás modellezése pl. Szigma-1 receptor esetében.