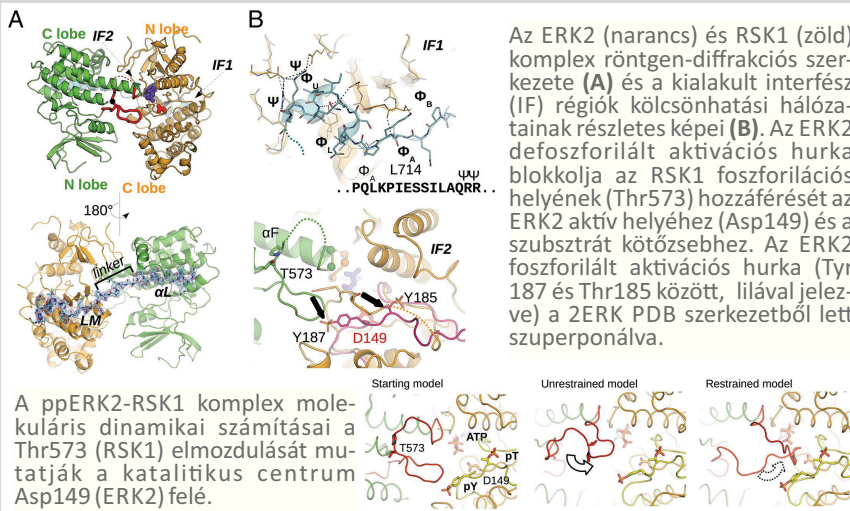


# Fehérje kinázok 4D-ben

Hetényi Csaba<sup>1</sup>, Reményi Attila<sup>2</sup>

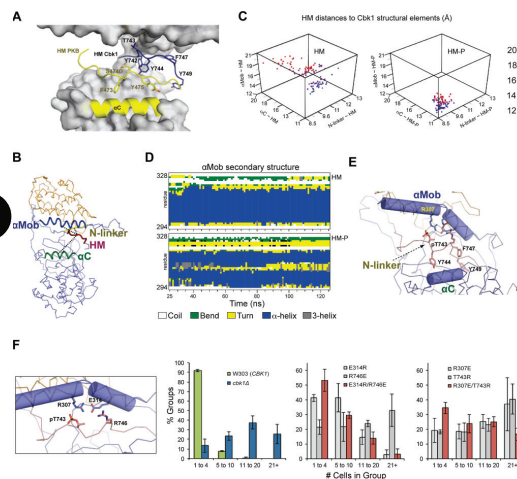
<sup>1</sup>MTA-ELTE Molekuláris Biofizikai Kutatócsoport, Budapest

<sup>2</sup>MTA Természettudományi Kutatóközpont, Budapest

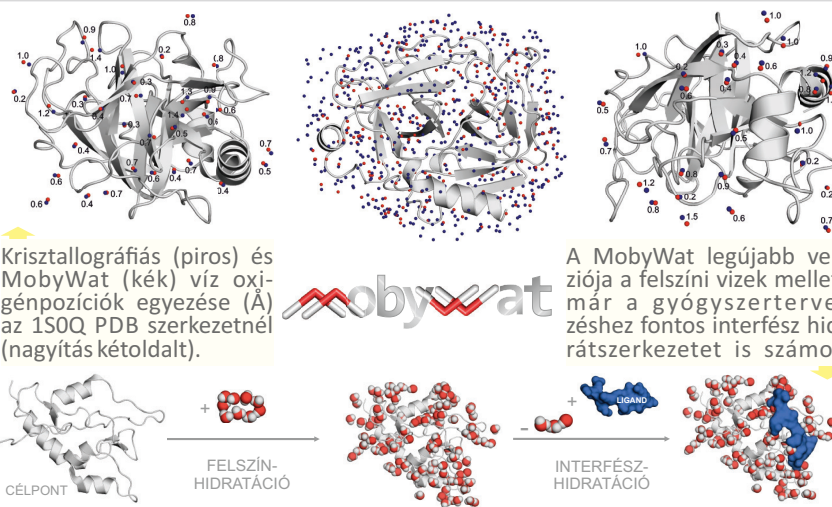


1 A tanulmányban az ERK2 és RSK1 kinázokból felépülő komplex szerkezetének röntgen-kristallográfiás meghatározását végeztük el, katalízis előtti állapotban és molekuláris dinamikai számításokkal bemutattuk a komplex átalakulását a szignál-kompetens állapotba. A szerkezeti eredményeket biokémiai és sejteken végzett vizsgálatokkal kombináltuk.

2 Meghatároztuk a Cbk1-Mob2 kináz-koaktivátor komplex röntgen-kristallográfiás szerkezetét, amely az első ilyen eredmény a NDR/LATS kináz-Mob típusú rendszerek esetében. Egy új szubsztrát-dokkolási mechanizmust is sikerült feltárnunk, amely eleddig ismeretlen volt az AGC család kinázai körében és a Cbk1 regulációs robosztusságát bizonyítja.



Munkánkat a Plos Biology folyóirat a címlapjára emelte, Jay Ryan művészi grafikájával.



3 A röntgen-kristallográfia korlátozottan képes a hidrátszerkezet meghatározására, mivel a víz oxigéntomjának elektronsűrűség-asszignációja nem mindig triviális. Szoftvert dolgoztunk ki a fehérjék hidrátszerkezetének számítására, amelyet több mint 1500 kísérletes vízpozíció segítségével validáltunk és a [www.mobywat.com](http://www.mobywat.com) oldalon ingyen elérhetővé tettünk.

- Alexa A, Gógl G, Glatz G, Garai Á, Zeke A, Varga J, Dudás E, Jeszenői N, Bodor A, **Hetényi C, Reményi A\***. (2015) Structural assembly of the signaling competent ERK2-RSK1 heterodimeric protein kinase complex. *Proc Natl Acad Sci USA*, 112, 2711-6.
- Gógl G, Schneider KD, Yeh BJ, Alam N, Nguyen AN, Moses AM, **Hetényi C, Reményi A\***, Weiss EL\*. (2015) The structure of an NDR/LATS kinase – mob complex reveals a novel kinase-coactivator system and substrate docking mechanism. *Plos Biology*, 13, e1002146.
- Jeszenői N, Horváth I, Bálint M, van der Spoel D, **Hetényi C\***. (2015) Mobility-based prediction of hydration structures of protein surfaces. *Bioinformatics*, 31, 1959-65.