**Fehérjék alakja és kompaktsága az NMR-SAXS tükrében**

Oldatfázisú 1H-NMR vizsgálatokat végeztünk, melyek során a jelintenzitás-gradiens erősség lecsengési görbékből diffúziós együtthatót határoztunk meg. Ebből az értékből kiszámítható a molekula látszólagos hidrodinamikai sugara (RH). Az NMR vizsgálatnak alávetett mintán ugyanolyan körülmények mellett kisszögű röntgenszórási (SAXS) méréseket végeztünk. A szórásgörbék kezdeti szakaszából, a minták jellemző méretének jellemzéséhez az ún. girációs sugarat (RG) számítottuk ki. A korábban már jellemzett globuláris lizozim fehérje RH és RG paramétereinek koncentráció, hőmérséklet és ionerősség függését tanulmányoztuk az alaktényezőt meghatározó RG/RH hányados változásának követésére, illetve az RG és RH legpontosabban meghatározásának elérésére.

Ezen eredményeinket további rendszereken is validáltuk. Vizsgáltuk a kalmodulin fehérje apo- és Ca2+ kötött formáit, megállapítottuk, hogy a girációs sugár kis mértékben, a hidrodinamikai sugár gyakorlatilag nem változik a bekövetkező konformációs változás hatására. Megállapításaink más, friss irodalmi adatok is igazolják (Panjkovich; Svergun: PhysChemChemPhys, 2016).

DHPC micellák vizsgálata nem gömbszimmetrikus, hanem nyújtott micella alakot eredményezett, ami szintén megfelel az irodalmi megállapításoknak (Lin et al, JACS, 1986).

Megmutattuk és különféle rendszerek esetében sikerrel teszteltük is, hogy az ilyen módon definiált alaktényező használata jogos és a fehérjék kompaktságának jellemzésére alkalmas paraméternek tűnik.