**Hetényi Csaba – Reményi Attila**

**Fehérje kinázok 4D-ben**

Kooperációnk a fehérje kinázok atomi felbontású, háromdimenziós szerkezeteiből indul ki, amelyeket Reményi Attila kutatócsoportja határoz meg röntgen-krisztallográfia segítségével. A kimért fehérjéket és ligandum-kötésüket a szerkezeti bioinformatika, ezen belül a dokkolás és a molekuladinamika eszköztárát felhasználva vizsgáljuk tovább. A molekuladinamikai vizsgálatok lehetővé teszik azt is, hogy megismerjük a fehérje kinázok működési mechanizmusának időbeli lefutását. Ezzel a kísérletes szerkezet-meghatározás három dimenzióját a negyedik (idő) dimenzióval is ki tudjuk egészíteni elméleti, molekulamodellezéses úton. Utóbbi kutatásaink során Hetényi Csaba munkacsoportjának tapasztalatára építünk, amely igen kiterjedten használ és fejleszt eljárásokat a fehérjék és komplexeik szerkezetének és energetikájának kutatásához. A kinázok ilyen dinamikus viselkedését is feltáró megközelítések szükségesek a működés egészének megértéséhez és a biokémiai mérések tervezéséhez, amelyeket szintén Reményi Attila kutatócsoportja végez el. Közös tanulmányaink eredeti felfedezésekhez vezethetnek a fehérje kinázok aktivitásának szabályozásában és kölcsönhatásaik specificitásának a tekintetében is. A projektben tehát a kísérletes és elméleti megközelítéseink nyerő szinergiájára építve, a kinázok teljes körű, 4D-re kiterjedő vizsgálatát tűzzük ki célul.

