**Fehérje kinázok 4D-ben**

dr. Hetényi Csaba és dr. Reményi Attila

Szinergia pályázatunk kapcsán vállaltuk, hogy fehérje kinázokból felépülő jelátviteli komplexeket részletes molekuláris dinamikai vizsgálatnak vetünk alá, valamint, hogy feltérképezzük azokat a molekuláris mozgásokat, melyek a kinázok működéséhez és allosztérikus úton való szabályozásához szükségesek. Kiindulási pontnak a Reményi csoport által meghatározott ERK2-RSK1 és Cbk1-Mob2 komplexek kristályszerkezetei szolgáltak. Molekuláris dinamikai szimulációk segítségével sikerült bemutatnunk, hogy miként áll össze egy katalitikus ERK2-RSK1 komplex, ami a sejtnövekedési pálya egy univerzálisan fontos kapcsolóállomása [1]. A Cbk1-Mob2 komplexen végzett számításaink pedig feltárták, hogy koaktivátor fehérjék (pl. Mob2) miként szabályozzák az NDR/LATS (pl. Cbk1) kinázok aktivitását [2]. Munkánk során azt kaptuk, hogy mind a fehérje felszínen, mind az interfész régiókban elhelyezkedő szerkezeti vízmolekulák szerepének pontosabb feltárása szükséges lenne. Így a következő félévben kutatásainkat kiterjesztjük a hidrát-szerkezet területére is.

1. Anita Alexa, Gergő Gógl, Gábor Glatz, Ágnes Garai, András Zeke, János Varga, Erika Dudás, Norbert Jeszenői, Andrea Bodor, **Csaba Hetényi and Attila Reményi**.

Structural assembly of the signaling competent ERK2–RSK1 heterodimeric protein kinase complex. *PNAS 112:2711-6, 2015*

2. Gergő Gógl, Kyle D. Schneider, Brian J. Yeh, Nashida Alam, Alex N. Nguyen Ba, Alan M. Moses, **Csaba Hetényi, Attila Reményi\*** and Eric L. Weiss.\* *(*\*Megosztott szenior szerzők)

The structure of an NDR/LATS kinase – Mob complex reveals a novel kinase-coactivator system and substrate docking mechanism.

*PloS Biology 13: e1002146, 2015*