

A kyszögű röntgenszórési módszer fejlesztése fehérjék oldatfázisú mérésére

Bóta Attila, Wacha András , Varga Zoltán

*MTA TTK Biológiai Nanokémia Kutatócsoport
1117 Bp. Magyar Tudósok krt. 2.*



*MEDINPROT Gépidő Pályázat támogatásával elért
eredmények*

MEDInPROT őszi konferencia, 2015.november 14. Budapest, ELTE TTK

A kisszögű röntgenszórási módszer fejlesztése fehérjék oldatfázisú mérésére

Bóta Attila, Wacha András, Varga Zoltán

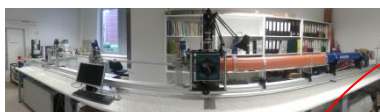
MTA TTK Biológiai Nanokémia Kutatócsoport 1117 Bp. Magyar Tudósok krt. 2.

A kisszögű röntgenszórás az oldott állapotú fehérjék és általában a nanorendszerek szerkezetvizsgálatának hatékony módszere. A pályázat támogatásával az általunk tervezett és épített CREDO (Creative Research Equipment for Diffraction) berendezés mintakezelési és mérési adatgyűjtő/feldolgozó környezetét fejlesztettük. (<http://credo.ttk.mta.hu>)



Fejlesztések

A minta – detektor távolság növelése:



MEDinPROT Gépidő pályázat

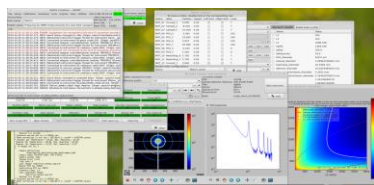
➤ Gyengén szóró fehérje minták mérése



Átfolyós mintatartó.
SiN ablakkal

Zárt kapilláris

Adatgyűjtő és feldolgozó rendszer fejlesztése, Gyorsabb mérések, Jobb jel/zaj arány, gyorsabb kiértékelés



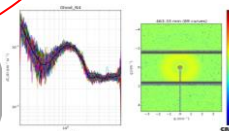
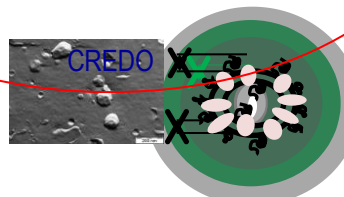
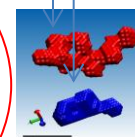
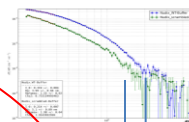
Eredmények

Kooperációs kapcsolatok, szinergia

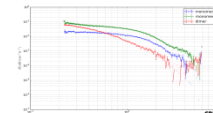
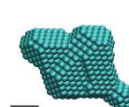
➤ Intézetben belül:



CREDO

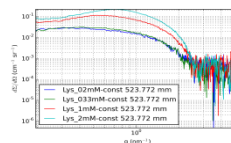


➤ Saját kutatások: erythroszómák



➤ Intézetben kívül: polipeptidok Perczel A. /ELTE

➤ Új kooperációk : Bodor A./ELTE

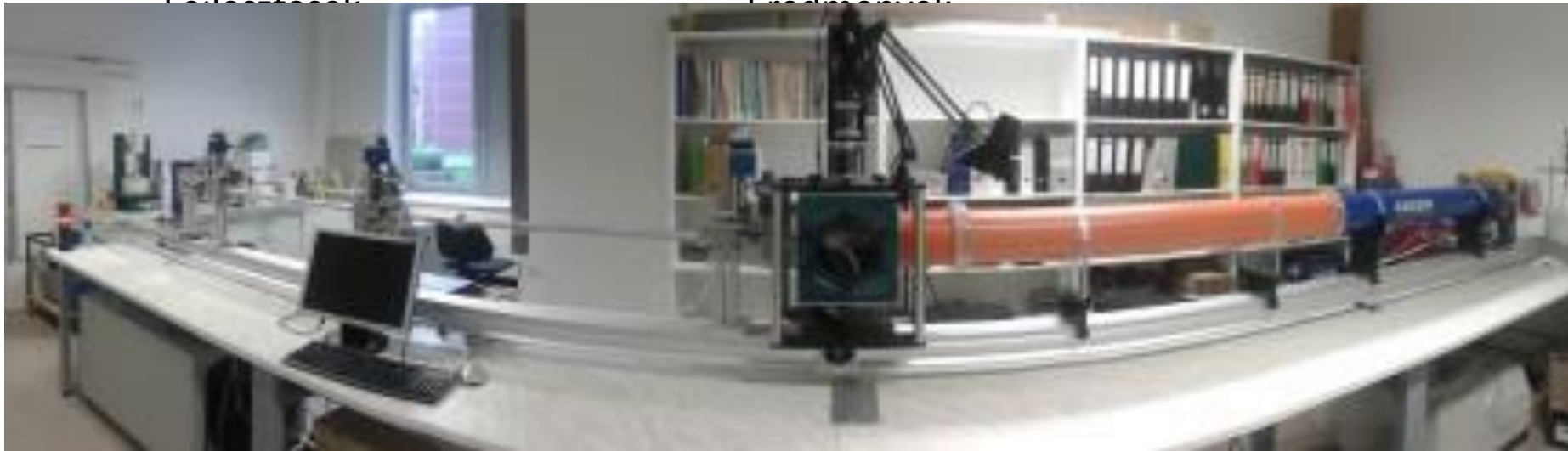


A kisszögű röntgenszórási módszer fejlesztése fehérjék oldatfázisú mérésére

Bóta Attila, Wacha András, Varga Zoltán

A minta-detektor távolság növelése

A kisszögű röntgenszórás az oldott állapotú fehérjék és általában a nanorendszerek szerkezetvizsgálatának hatékony módszere. A pályázat támogatásával az általunk tervezett és épített CREDO (Creative Research Equipment for DiffractiOn) berendezés mintakezelési és mérési adatgyűjtő/feldolgozó környezetét fejlesztettük. (<http://credo.ttk.mta.hu>)

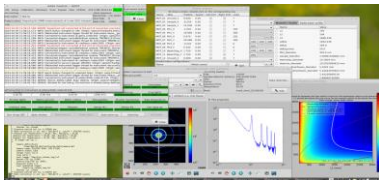


Zárt kapilláris

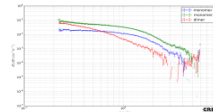
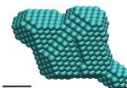
A mérési tartomány kiszélesítése

0.2 - 400 nm mérettartományba

adatgyűjtő/feldolgozó környezet fejlesztése, Gyorsabb mérések, Jobb jel/zaj arány, gyorsabb kiértékelés



➤ Saját kutatások: erythrocytómák

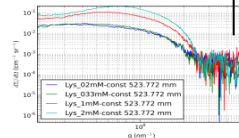


+ 1.2 m

➤ Intézeton kívül: polipeptidok Perczel A./ELTE

➤ Új kooperációk: Bodor A./ELTE

2.85 m

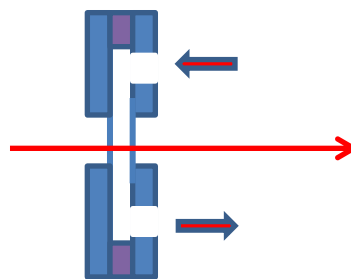


Mintatartó fejlesztések

Mintatartó tér

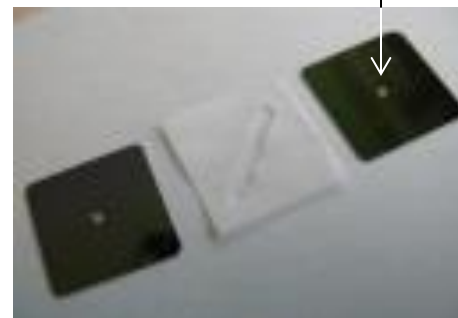


Átfolyós mintatartó



párhuzamos
ablakok

100 nm vastag SiN
ablak (30 \$ /2db)



Kapilláris mintatartók
zárható és átfolyós
kivitelben

Software fejlesztések

The screenshot displays the SAXS Control software interface, which is a complex control system for X-ray scattering experiments. The main window is titled "SAXS Control -- ROOT" and contains several panels:

- System Status:** A top-left panel showing system information like "File Setup Calibration Hardware Scan Expose View Utilities 432.0 MB 00:03:43". It also displays user information (Wacha) and project details (Preparing for IRMM measurements of a new SiO2 nanopart).
- Log:** A central log window showing a series of system messages, including errors like "Equipment not connected at the end of connection procedure" and "GeniX status changed to: idle".
- Motor Control:** A table listing various motors (MOT_01 to MOT_12) with their positions, speeds, and limits. A "Motor control" dialog box is open, showing a table of motor configurations.
- Pinhole Calculator:** A window for calculating pinhole parameters, showing "Numeric results" and "Radial beam profile".
- 2D Data Viewer:** A window showing a 2D diffraction pattern (a circular spot) and a corresponding 1D intensity profile plot. The plot shows a series of peaks on a logarithmic scale.
- Interlock and Control Panels:** Several panels at the bottom for controlling the experiment, including "Interlock" (with "Overridden" status), "Warm-up", "X-ray lights", and "Shutter lights".
- System Information:** A panel at the bottom left showing detailed system parameters like "Exposure period set to: 1.015000 sec", "Rate correction is on", and "Camera definition".

A berendezés beállítása és a minta állapotának kontrollja (T, idő, egyéb)

A. Wacha, Z. Varga and A. Bóta: CREDO: A New General-Purpose Laboratory Instrument for Small-Angle X-ray Scattering, **Journal of Applied Crystallography**, 47 (2014) 1749-1754.

A. Wacha: Optimized pinhole geometry for small-angle scattering, **Journal of Applied Crystallography**, 48 (2015) xxxx-xxxx.



Small Angle Scattering Biological Data Bank

Curated repository for small angle scattering data and models

Small angle scattering (SAS) of X-ray and neutrons provides structural information on biological macromolecules in solution at a resolution of 1-2 nm.

SASBDB is a fully searchable curated repository of freely accessible and downloadable experimental data, which are deposited together with the relevant experimental conditions, sample details, derived models and their fits to the data.

SASBDB currently contains:

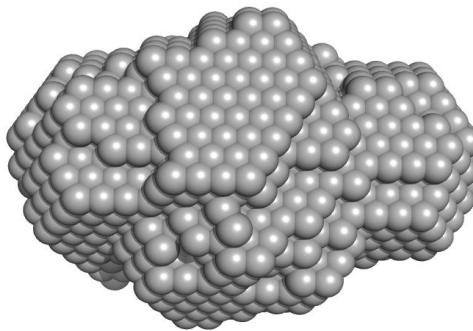
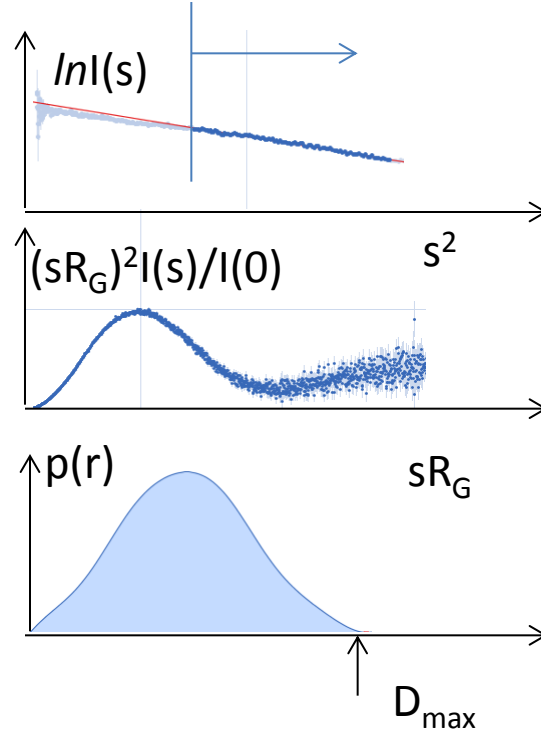
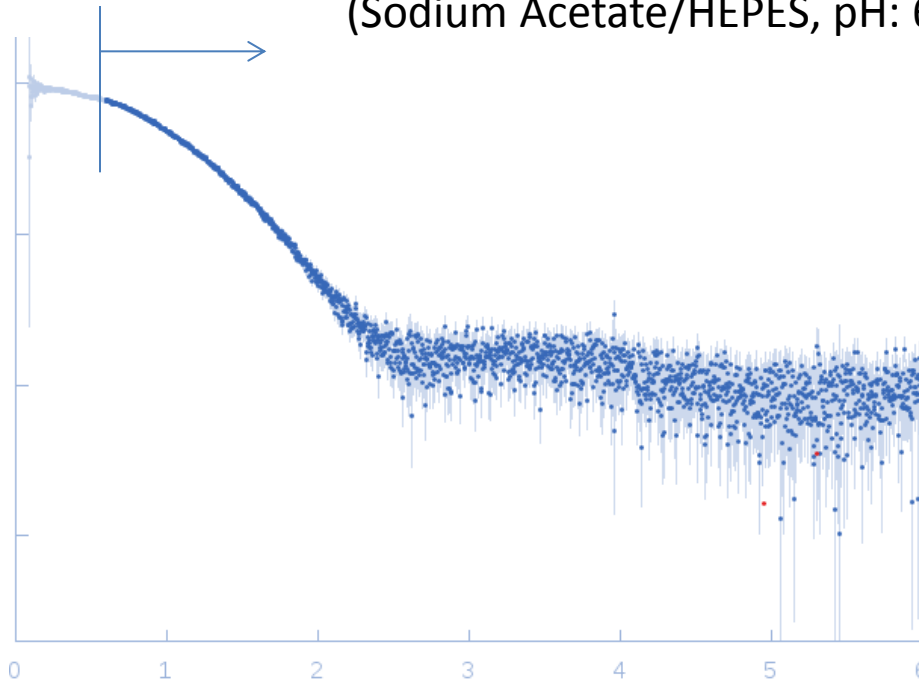
138 experimental data sets

234 models

SASDAC2 – Lyz

(Sodium Acetate/HEPES, pH: 6.8)

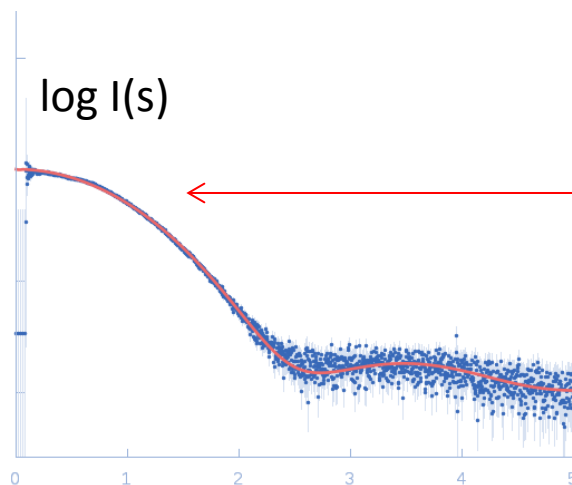
R_g : 1.4 nm D_{max} : 4 nm



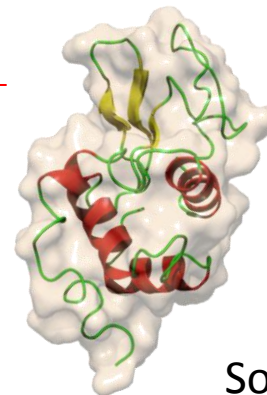
DAMMIF/DAMMIN modell

Nat Methods 2015 May;12(5):419-22
Franke D, Jeffries CM, Svergun DI,

SASDAC2 – Lyz in Sodium Acetate



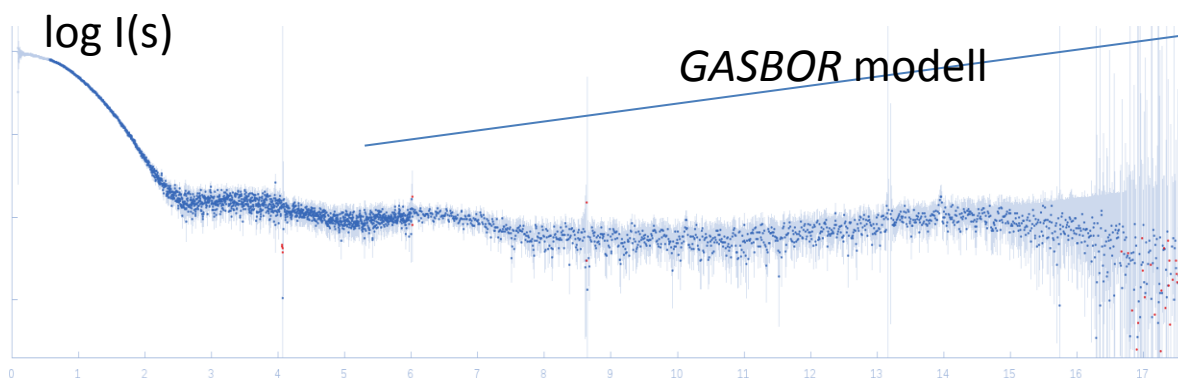
CRY SOL modell



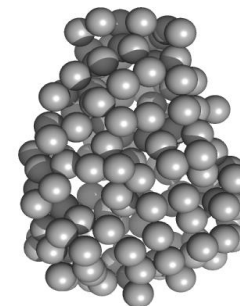
Sodium Acetate, pH: 3.8

SAXS data collected at X33, DORIS 2012-Sep-21
Darja Ruskule

SASDAG2 – Lyz in Sodium Acetate



GASBOR modell



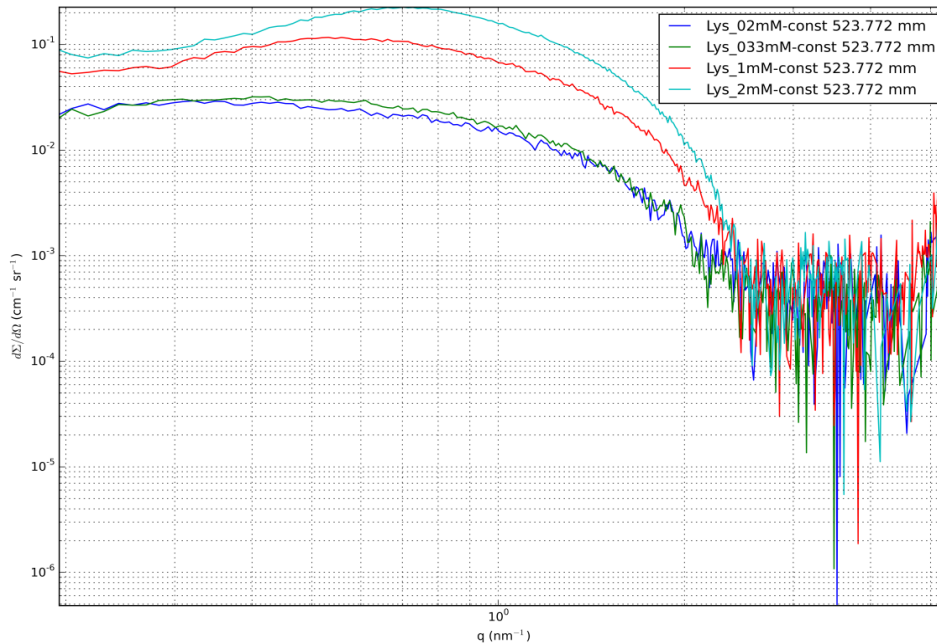
SWAXS data collected at X33, DORIS 2012-Sep-21
Darja Ruskule

Új kutatások: Fehérjék kompaktsága / Bodor A.

(ELTE, NMR labor)

Lizozim vizes oldatban (standard protein: monodiszperz, monomodális, globuláris megfelelő elektrolitban, pufferben)

korrelációs „csúcs” a térbeli rendezettség következménye



Lizozim vízben , pH=3.3

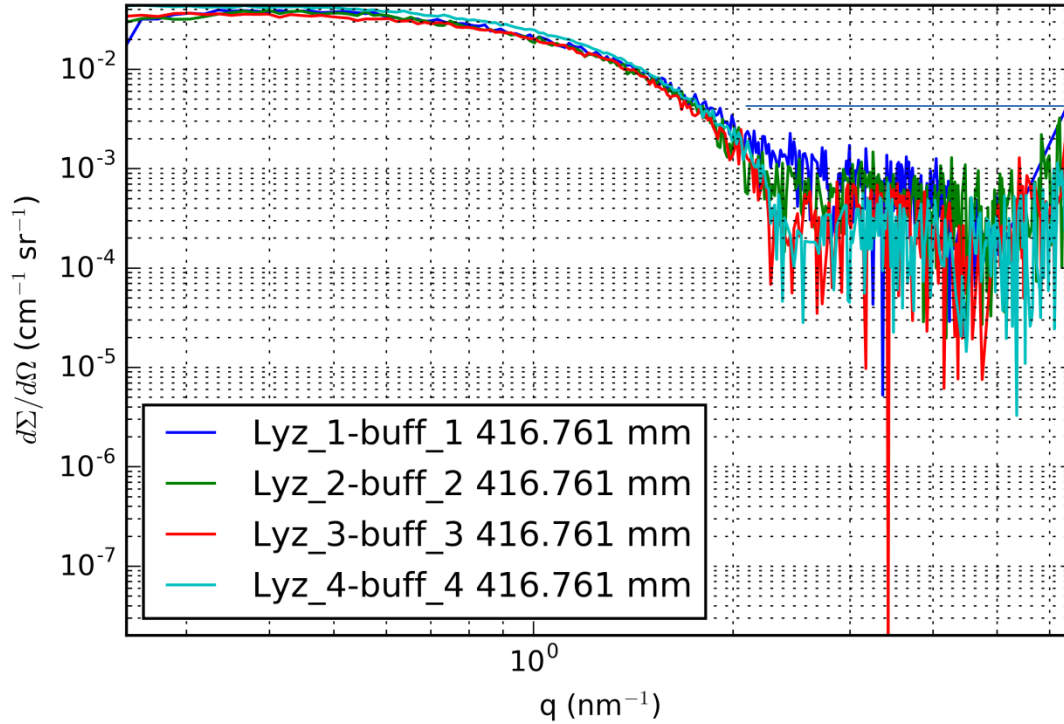
2 mM

1 mM

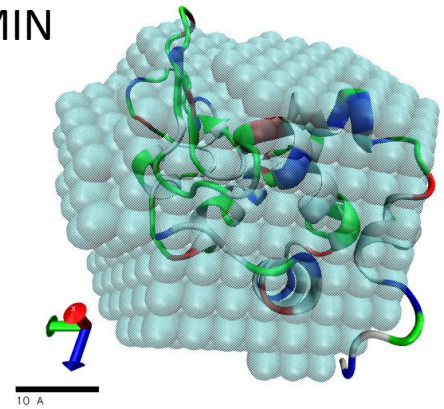
0.33, 0.2 mM

Lizozim , 0.4 mM , NaCl vizes oldata

víz
12.5 mM NaCl
77 mM
125 mM



DAMMIN



Köszönjük a MEDinPROT támogatását!