

Fehérjék alakja és kompaktsága az NMR-SAXS tükrében

Bodor Andrea, Bóta Attila

ELTE, Kémiai Intézet, Szerkezeti Kémia és Biológia Laboratórium
MTA-TTK Biológiai Nanokémia Kutatócsoport

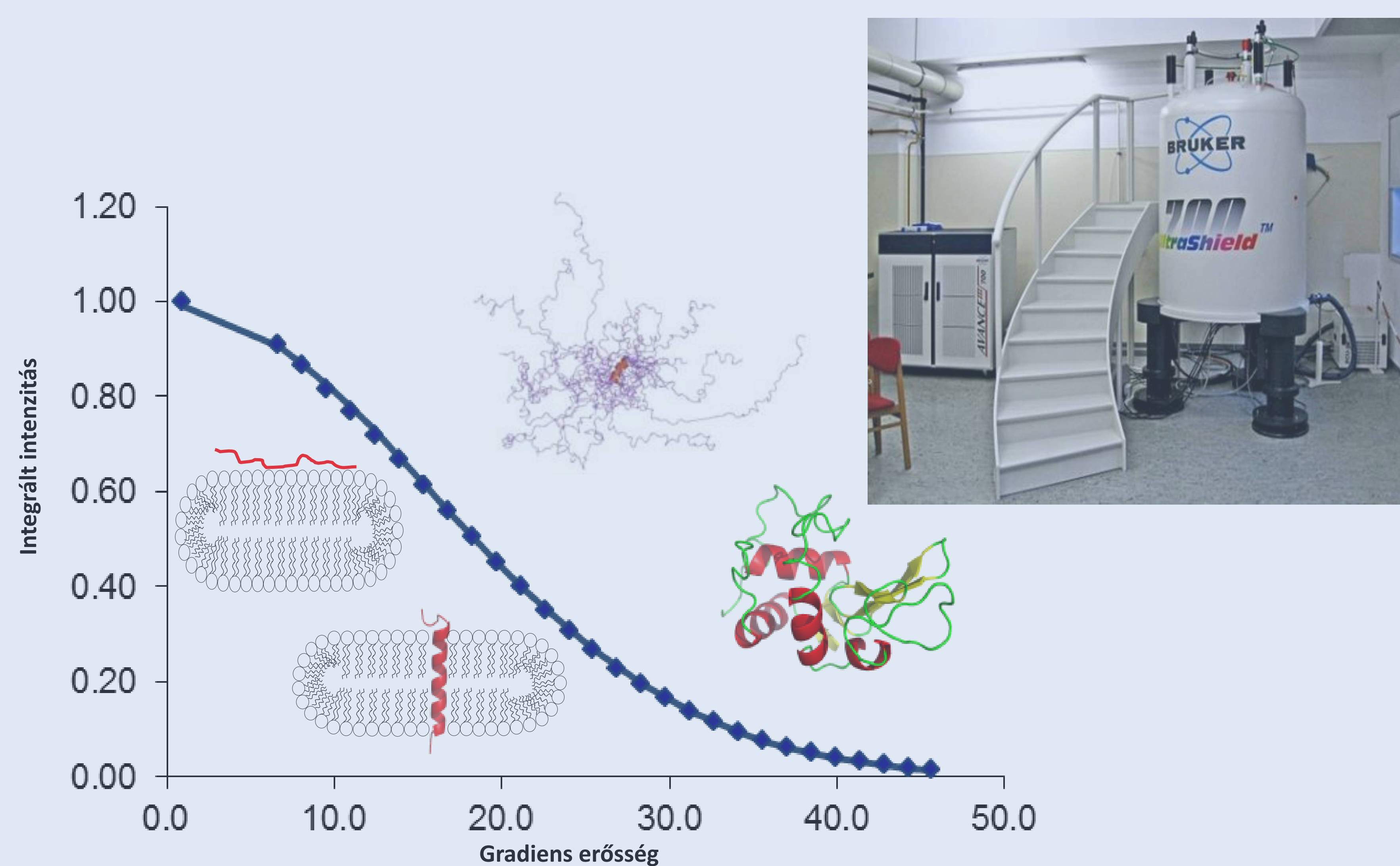


Együttműködésünk célja két független módszer (NMR, SAXS) szinergiájának kihasználása a fehérjék alakjának és kompaktságának jellemzésére és azok változásával összefüggő biológiai funkciók feltárására.



Oldatfázisú NMR vizsgálatok

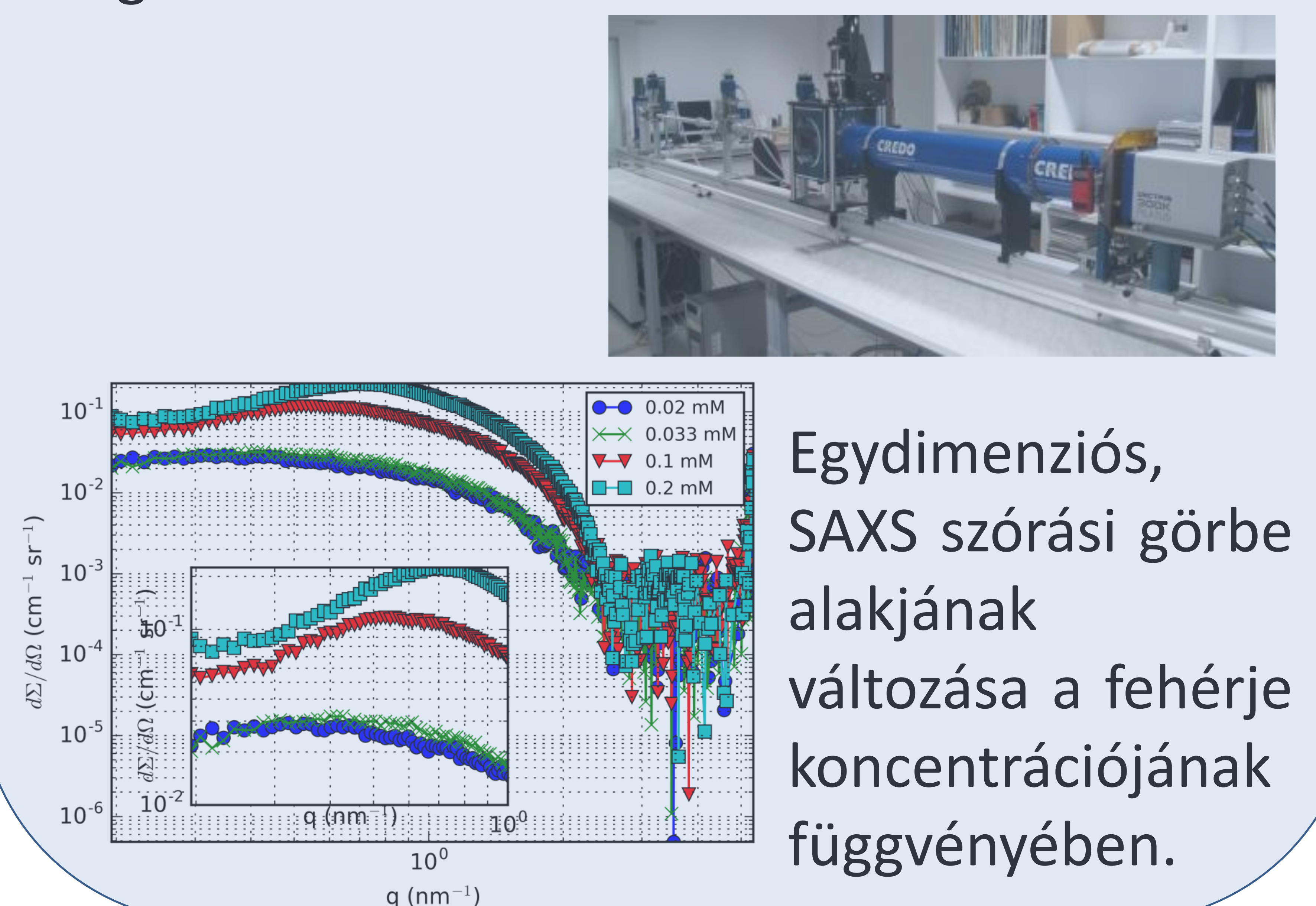
A jelintenzitás-gradiens erősség lecsengési görbékből a diffúziós együttható (D) meghatározása. Az alifás protonok intenzitás-változását követjük.



A Stokes Einstein egyenlet alapján a látszólagos hidrodinamikai sugár számítása (R_h).

Oldatfázisú SAXS vizsgálatok

A fehérjék alacsony felbontású szerkezetének és alakjának meghatározása. A szórásgörbék kezdeti szakaszából a girációs sugár (R_g) meghatározása, a fehérje monomolekulás vagy aggregációs formáinak megkülönböztetése.



Egydimenziós, SAXS szórási görbe alakjának változása a fehérje koncentrációjának függvényében.

Tanulmányozott rendszerek

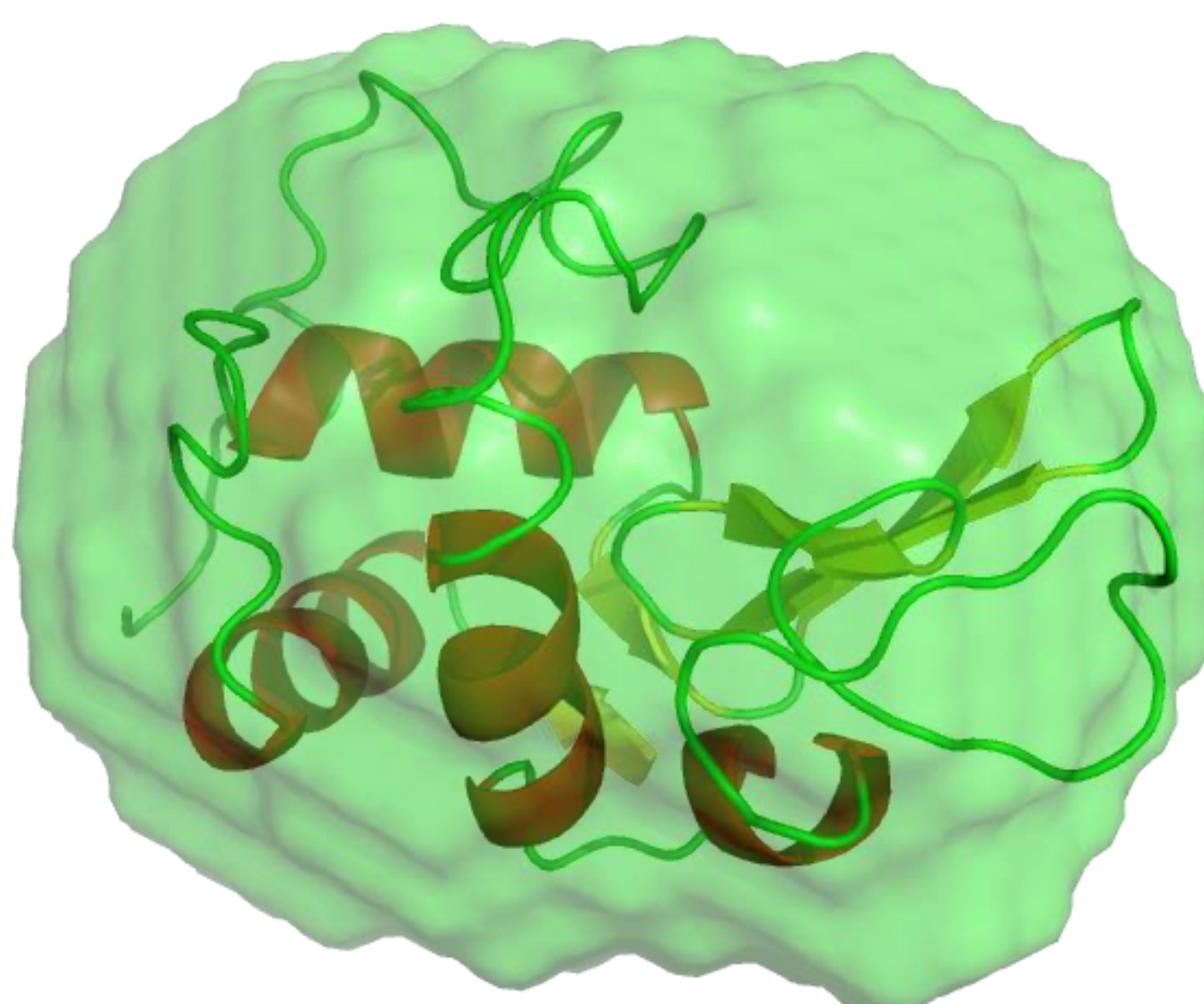
- globuláris fehérjék
- rendezetlen fehérjék
- micellák, bicellák
- bicellába ágyazott fehérjék

Körülmények

Koncentráció, ionerősség, hőmérséklet függés

Meghatározandó paraméterek

Alaktényező (R_g/R_h)
Kompaktsági faktor



A módszer validálása

0,5 mM lizozim fehérje
120 mM NaCl, 298K

$$R_h = 18,9 \pm 0,1 \text{ \AA}$$

$$R_g = 14,5 \pm 0,1 \text{ \AA}$$

$$R_g/R_h = 0,77 \text{ (irodalmi érték)}$$

A nagy térerejű NMR készülék és a SAXS berendezés szomszédos épületekben való elhelyezése lehetővé teszi *ugyanazon minta ugyanazon kísérleti körülmények* mellett történő vizsgálatát, ezáltal egy megbízható adatbázis létrehozását.