

7. Elméleti biofizika

BEVEZETŐ

Simon István

PhD, DSc,
MTA Természettudományi Kutatóközpont
Enzimológiai Intézet
simon.istvan@ttk.mta.hu

Hegedűs Tamás

PhD, MTA–Simmelweis Egyetem
Molekuláris Biofizikai Kutatócsoport,
Simmelweis Egyetem Biofizikai és Sugárbiol. Intézet
hegedus@hegelab.org

Régi adósságából törlesztett a Magyar Biofizikai Társaság azzal, hogy fórumot biztosított az elméleti biofizika művelőinek. Elképzelhető, hogy a magyar elméleti biofizikusok nincsenek megfelelően képviselve a különböző programokat meghatározó testületekben, munkáik ezért kerülnek ritkábban látókörbe, mint azt tevékenységük nemzetközi visszhangja indokolná. Ezért örvendetes, hogy ezt a szekciót, a szervezők dicséretes bölcsességgel megtartott közvéleménykutatása eredményeként felvették a programba. A szekcióban öt előadótól hallhatunk egy-egy jó előadást. Jobb jelzöt azért nem használunk, mert mi, társelnökök is az előadók között voltunk. Az előadások tematikailag elég távol álltak egymástól, így az adott tudományterület jelentős részébe engedtek bepillantást. A következőkről hallottunk:

Az első, *Fehérjeszerkezetek bioinformatikai és statisztikus fizikai vizsgálata* című áttekintő előadásában Simon István beszámolt az adott területen az elmúlt évtizedekben elért eredményekről, beleértve saját csoportjának eredményeit is.

A második előadásban, amit az előadó, Derényi Imre, munkatársával, Szöllősi Ger-

gely Jánossal jegyzett *A rák kockázata az őssejtek osztódási számának tükrében* címmel, egyrészt kritikai elemzést adott Christian Tomasetti és Bert Vogelstein nemrég megjelent és nagy vihart kavart *Science*-cikkéről (2015), majd saját munkájukra térve rámutatott, hogy a rák elleni védekezés az evolúciós hajtóereje a szöveti megújulás hierarchikus szerveződésének.

A harmadik előadó Ferenczy György volt, aki Kellermayer Miklóssal közösen végzett kutatásairól számolt be a *Fibronektin és immunoglobulin domének erővezérelt szerkezetváltozásai: atomi mechanizmusok összehasonlító vizsgálata* című előadásában. Kellermayer Miklós két évtizede vizsgálja a multidomén titin óriásmolekula különböző doménjeinek mechanikai, *foldíng* és *unfoldíng* sajátosságait. Ennek a nagyívú munkának aktuális eredményeiről szolt az előadás.

A negyedikként előadó Vass Imre volt, aki Sass Lászlóval és Deák Zsuzsannával készített munkájukról számolt be *Fotoszintetikus elektrontranszport folyamatok in silico modellezése* címmel. A munka eredményeként egy sokoldalúan hasznosítható modellezési platformot hoztak létre a cianobakteriális elektron-

transzport vizsgálatára és a bioüzemanyag-előállítás optimalizálására, ami alkalmas *in silico* fotoszintézis kísérletek végzésére.

Végül, ötödik előadóként Hegedűs Tamás, egy Szöllősi Dániellel, Erdei Áronnal és Gyimesi Gergellyel együtt végzett munkáról *Az aril-hidrokarbon receptor (AhR) drogfelismerésének in silico jellemzése* címmel számolt be. Csoportjuk érdeklődésének központjában azok a szerkezeti és dinamikai tulajdonságok állnak, amelyek képessé teszik bizonyos fehérjék (például: multidrog transzporterek, metabolikus enzimek és ligandfüggő transz-

kripciók faktorok) széleskörű ligand-, illetve szubsztrátfelismerését. Eredményeik arra utalnak, hogy nem egyedül a kötőseb felelős az idegennek minősülő mérgező anyagok vagy gyógyszermolekulák és a sejt saját vegyületei közötti különbségtételért, hanem a kötősebhez vezető útvonal is kritikus szerepet játszik a felismerő folyamatban.

Az előadók közül Derényi Imrét felkértük egy cikk megírására.

Kulcsszavak: *elméleti biofizika, szerkezeti biológia, bioinformatika, in silico modellezés*

HIVATKOZÁS

Tomasetti, Christian – Vogelstein, Bert (2015): Variation in Cancer Risk among Tissues Can Be Explained by the Number of Stem Cell Divisions. *Science*. 347,

6217, 78–81. DOI: 10.1126/science.1260825 • <http://www.uvm.edu/~cdanfort/csc-reading-group/tomasetti-science-2015.pdf>

