

## **Szerkezeti kémia és biológia (megemlékezés Náray-Szabó István és Kálmán Alajos akadémikusokról)**

### **Náray-Szabó Gábor: Náray-Szabó István**

A röntgendiffrakciós módszer volt az első, mellyel meg lehetett határozni az atomok elrendeződését egy kristályon belül. Az eljárással Náray-Szabó István berlini és manchesteri tanulmányútja során ismerkedett meg és sikerrel alkalmazta ezt több szilikát ásvány szerkezetének meghatározására. Hazatérve jelentősen hozzájárult a szerkezetkutatás - e máig meghatározó jelentőségű módszerének - alkalmazásához és elterjesztéséhez. Az előadásban életútját és legfontosabb eredményeit mutatom be.

### **Sohár Pál: Kálmán Alajos, a reneszánsz ember**

Kálmán Alajos a magyarországi krisztallográfia kiemelkedő személyisége, tudományterülete nemzetközi elismertségű szaktekintélye, s a hazai tudományos közélet meghatározó, karizmatikus személyisége volt. Megkísérlem számba venni azon tulajdonságait, jellemzőit, amelyeknek köszönhetően vált a hazai vegyésztársadalom nagyra becsült, köztiszteletnek örvendő, s megnyerő alakjává. Az azonos korú jóbarátéval és kutatótársal sok tekintetben párhuzamos életpályánk néhány mozzanatát is felvillantja a megemlékezés.

### **Hargittai István: Szerkezeti kémia/biológia: Eszközök és gondolatok**

Ez a bevezető előadás a szerkezeti kémia/biológia fejlődésével kapcsolatban három kérdéssel foglalkozik:

1. az eszközök és gondolatok relatív fontossága,
2. a rendezettség és rendezetlenség kutatása, és
3. a szabályosan ismétlődő és az egyedi szerkezeti jellegzetességek kezelése.

Mindhárom kérdés a szerkezeti kémián és biológián túl természetfilozófiai és episztemológiai szempontból is érdekes.

### **Császár Attila: Túl a szerkezeti kémia standard modelljén**

A kémia, ezen belül a szerkezeti kémia, egyik legfontosabb, standard modellje az, hogy a molekuláris rendszerek rendelkeznek a klasszikus mechanikai értelemben vett térszerkezettel. A jól meghatározott és kísérleti (diffrakciós és spektroszkópiai) módszerek segítségével felderíthető térszerkezet meglétének feltételezése igaz az anyag minden halmazállapotára. Jelen előadás kizárólag molekuláris (semleges és töltéssel rendelkező) rendszerek gázfázisú

szerkezetével és a szerkezet szimmetriájával kíván foglalkozni. Ezen belül is azok az esetek kerülnek kiemelten tárgyalásra, ahol a klasszikus szerkezeti modell, mely a kvantummechanikának a Born-Oppenheimer közelítés (a magok és elektronok mozgásának szétválasztása) keretén belüli egyszerűsítésén alapul, kisebb vagy nagyobb mértékben, de sérül.

### **Kamarás Katalin: Szén nanocső alapú hibrid rendszerek szerkezetvizsgálata**

A szén nanocsövek szerteágazó alkalmazási lehetőségeinek egyik oka az, hogy a grafén "feltekerésével" származtatott, különböző kiralitású egyedi csövek elektronszerkezete és elektromos, illetve optikai tulajdonságai változatosak (fémes, félvezető tulajdonságok, frekvenciafüggő abszorpció stb.). A kiralitás szerinti elválasztás ma már rutineljárásnak számít: az egyedi nanocsövek izolálása és vizsgálata is megoldott. További érdekesség az, hogy az üreges szerkezet tartályként szolgálhat számos kisebb egységnek, elsősorban szerves molekuláknak. Ezzel részben olyan hibrid anyagok jönnek létre, melyekben a bezárt molekulák másképp rendeződnek, mint a szabad térben, vagy egy kétdimenziós felületen (nanotartályok). Részben olyan reakciók jöhetnek létre, melyek a belsejtér speciális, egydimenziós jellegét használják ki (nanoreaktorok). Előadásomban ezekre hozok néhány példát, illetve bemutatok olyan nanoskálájú szerkezetvizsgálati módszert, amelyek az utóbbi években terjedtek el, kihasználva a szilárdtestfizika és a szerkezeti kémia legújabb eredményeinek szinergiáját.

### **Fülöp Vilmos: A kémiai krisztallográfiától a szerkezeti biológiáig**

Mint egykori doktorandusz és kolléga, a Kálmán Alajos csoportban eltöltött évekről és tanulmányaimról fogok beszélni. A fehérjekrisztallográfiát egy magyar vonatkozású enzim, a prolil-oligopeptidáz térszerkezet-meghatározásán keresztül mutatom be, külön hangsúlyt szentelve a gyógyszerkutatásban betöltött szerepére. Végül a szerkezeti biológia legújabb eredményeit villantom fel vázlatosan.

### **Keserű György Miklós: Szerkezet alapú gyógyszertervezés: a kiindulópontoktól a gyógyszerjelöltekig**

Emil Fisher évtizedekkel a molekuláris biológia és a farmakológia térhódítása, a fehérjeszerkezetek meghatározására alkalmas módszerek megalkotása előtt, 1894-ben vetette fel, hogy egy enzim szubsztrátspecifitása a komponensek egymást kiegészítő geometriai formáinak köszönhetően, azok illeszkedésén alapul. Az elképzelés szerint a fehérje és

liganduma úgy illeszkedik egymáshoz, mint kulcs a zárba. Bár a kulcs-zár modell nem vette figyelembe a fehérje-ligandum rendszer konformációs dinamikáját, a leírt molekuláris felismerési folyamat máig meghatározó eleme a szerkezet alapú gyógyszertervezésnek. Az előadás bevezetést nyújt a gyógyszertervezési módszerek azon csoportjába, melyek a gyógyítani kívánt betegséghez kapcsolódó célfehérje térszerkezetén alapulva keresnek kötődő molekulákat. A legfontosabb eljárások áttekintését követően több alkalmazásra mutatok példát, amelyek bemutatják a szerkezet alapú gyógyszertervezés eredményeit, a kémiai kiindulópontok azonosításától a vezérmolekulák optimalálásán át, a gyógyszerjelöltek felfedezéséig.

### **Perczel András: Egy arc két orcája: fehérjeszerkezet és belső dinamika**

Az olyan alaptulajdonságok mellett, mint aminosav sorrend, 3D-téralkat, vagy elektrosztatikus potenciál, egy fehérje biológiai aktivitást alapvetően befolyásolja a makromolekula és komplexének belső mozgása. A legkülönfélébb biológia szerepre szakosodott globuláris, fibrilláris vagy IDP (*Intrinsically Dynamic Protein*) rendszerek széles időskálájú dinamikus viselkedése mind NMR, röntgen vagy/és krioEM mérések alapján hatékonyan vizsgálható és jellemezhető. A fehérjemozgások és a különböző technikák rövid bemutatása mellett, az előadás változatos példákon keresztül szemlélteti azt, hogy a dinamikus térszerkezet hogyan teszi lehetővé a fehérjék bioaktivitásának finomhangolását.