

## Beszámoló

A 2003-2006 időszakban végzett kutatómunkám a stabilizációs centrumok azonosítására szolgáló SCIDE nyilvános szerver világhálóra telepítésével, illetve az ezt bemutató Bioinformatics cikk közlésével kezdődött. Az SCIDE szervert a csoportunkban készült többi szerverrel együtt bemutattuk egy a Nucleic Acid Res. folyóiratban megjelent cikkben is. A stabilizációs centrumoknak a fehérjék többi, funkcionális szempontból fontos részeihez való viszonyát a J. Chem. Inf. Comp. Sci.-ben közöltük.

A program közepétől, az időközben az irodalomban megjelent munkák által felvetett igénynek megfelelően, tevékenységem a globuláris fehérjék vizsgálatán túl kiterjedt a globuláris és transzmembrán fehérjék automatizált megkülönböztetésére, a transzmembrán fehérjék membránhoz viszonyított helyzetének meghatározására, valamint a vízoldható de csak részben vagy egyáltalán nem globuláris fehérjék az úgynevezett rendezetlen fehérjék vizsgálatára is.

Kidolgoztunk egy TMDet nevű algoritmust, mely automatikusan szelektálja a vízoldható és transzmembrán fehérjéket és azonosítja a transzmembrán fehérjék membránhoz viszonyított helyét és orientációját. Ezzel és egy további algoritmusunk felhasználásával létrehoztuk a hetente folyamatosan frissülő PDB\_TM adatbázist. A világhálón elhelyeztük a TMDet és a PDB\_TM nyilvános szervereket. Az algoritmusokról és szerverekről két Bioinformatics és egy Nucleic Acids Res. cikkben számoltunk be.

A szekvencia-térszerkezet párosító (threading) eljárásokban széles körben elterjedt aminosav-aminosav kölcsönhatási potenciálok felhasználásával módszert dolgoztam ki rendezetlen fehérjék illetve fehérje szegmenseknek a szekvenciából történő becslésére. A munka a J. Mol. Biol.-ban jelent meg. Az algoritmus felhasználásával nyilvános szervert telepítettem a világhálóra. Ezt egy Bioinformatics cikkben mutattam be. A rendezetlen fehérjéket, szegmenseket becselő módszerekről egy könyvfejezet is készült ami a Methods Mol. Biol.-ban fog megjelenni. Kimutattam, hogy a rendezetlen fehérjék a proteomokban nagyobb gyakorisággal fordulnak elő mint az a genom szintű vizsgálatok alapján várható lenne, sőt a proteomokon belül az esszenciális fehérjék között még a többinél is nagyobb a rendezetlen fehérjék aránya. Valószínűleg nem független ettől az az eredmény, hogy a fehérje hálózatok csomópontjain lévő fehérjék közül az átlagosnál több a rendezetlen fehérje. A két munka egy-egy J. Proteome Res. cikkben jelent meg. Rámutattam, hogyan racionalizálhatók a térszerkezet meghatározásnak alávetni érdemes fehérjék kiválasztása a rendezetlenséget becselő módszerek felhasználásával. Kísérletes munkát végző kollégáimmal összefoglaltuk a proteome szinten alkalmazható kísérletes technikákat a rendezetlen fehérjék kimutatására. Ez a két munka a Current Protein and Peptide Sci. folyóirat 2007.-es 2. számában jelenik meg. Részt vettem továbbá ausztrál kollégákkal a Bal32a fehérje az "alpha-beta barrel" fehérje család egy új tagjának leírásában. Az erről szóló cikk a J. Mol. Biol.-ban jelent meg.

Összegezve, a munkák alapján a négy év alatt elkészült 4 nyilvános szerver, egy könyvfejezet és 13 cikk amelyek közlő folyóiratok impakt faktorának összege 74. Emellett, irányítással két fizikus hallgató írta meg diplomamunkáját.