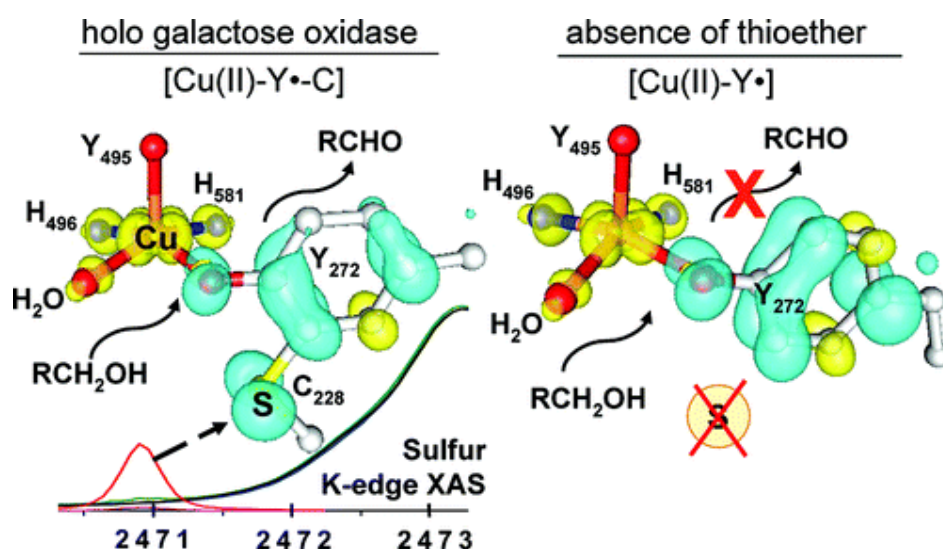


Kémiai virtuális valóság a bioszervetlen rendszerek és metalloenzimek világában

Szilágyi Róbert Károly

Kémia és Biokémia Tanszék, Montanai Állami Egyetem, Bozeman, MT, 59717

Az elméleti kémia eszköztárának fejlődése és a kapcsolódó számítógépes hardver elérhetősége lehetővé tette, hogy mindenki számítógépes modellekkel dolgozzon és azok segítségével gondolkodjon. Kis túlzással, manapság egy tudományos publikációtól szinte már követelmény, hogy egy-két "DFT-s eredményt" is tartalmazzon. Ugyanakkor ez nagyon sok veszélyt rejt és sajnos megfigyelhetjük a szakirodalomban egyfajta felhígulását. Konkrétabban fogalmazva, a molekulamodellőzés egyre szélesebb körű használatával egyre csökken a kísérletező és az elméleti emberek között az egymás munkája iránt mutatott bizalom.



Ez a szakadék képződés a számítógépes molekulamodellőzés terén különösen súlyos a metalloenzimatika területén. Az előadás a galaktóz oxidáz példáján kívánja bemutatni a csapdákhoz vezető modellezési lépéseket. A lehetséges hibák feltárása mellett megoldásokat mutat be, hogyan lehet például röntgen abszorpciós spektroszkópiai eredményeket közvetlenül felhasználni metalloenzimek aktív centrumának virtuális kémiai modellépítésére, ahol a modellek nem csak úgy néznek ki mint a valós kémia rendszer, de úgy is működnek. Az előadás végén a jelen futó kutatási munkákból is felvillan majd egy két példa.

Ajánlott irodalom:

1. Rokhsana D., Howells A.E., Dooley D.M., Szilágyi R.K.: **Role of the Tyr-Cys Cross-link to the Active Site Properties of Galactose Oxidase** *Inorganic Chemistry*, 2012, 51(6), 3513-3524
2. Rokhsana D., Dooley D.M., Szilágyi R.K.: **Systematic development of computational models for the catalytic site in galactose oxidase: impact of outer-sphere residues on the geometric and electronic structures** *Journal of Biological Inorganic Chemistry*, 2008, 13(3), 371-383
3. Rokhsana D., Dooley D.M., Szilágyi R.K.: **Structure of the Oxidized Active Site of Galactose Oxidase from Realistic *In Silico* Models** *Journal of the American Chemical Society*, 2006, 128(49), 15550-15551