

A cisztein konformációs eloszlásának vizsgálata IR lézerbesugárzással kombinált mátrixizolációs technikával

Najbauer Eszter Éva, III. évfolyam Kémia BSc.

ELTE TTK Kémiai Intézet, Szervetlen Kémiai Tanszék

Témavezető: **Dr. Tarczay György**, docens
ELTE TTK Kémiai Intézet

Az aminosavak a fehérjék építőköveiként a leggyakrabban vizsgált molekulák közé tartoznak. Többek között konformációs eloszlásuk is egy izgalmas téma, melynek meghatározására számos módszert alkalmaznak. A vizsgálatok jelentőségét az adja, hogy sok esetben, így több aminosav esetében is azt tapasztalták, hogy nem minden olyan konformer mutatható ki kísérletileg, amelynek az elméleti számítások szerint elvileg kimutatható mennyiségben kellene előfordulnia.

Tudományos diákköri munkám során a ciszteint vizsgáltam mátrixizolációs infravörös spektroszkópia segítségével. Munkám elődleges célja az volt, hogy infravörös lézer használatával kiegészített mátrixizolációs IR spektroszkópiai technikával azonosítsam a cisztein konformereit. Kísérleteim során szelektív lézeres besugárzást alkalmaztam, amelynek hatására bekövetkező konformerarány-változás lehetőséget ad arra, hogy ilyen bonyolult esetben is el tudjuk választani a különféle konformerekhez tartozó spektrumvonalakat, be tudjuk azonosítani a molekula mátrixban jelenlevő konformereit.

Korábbi mátrixizolációs vizsgálatokkal kimutatható volt, hogy mind hidrogénkötésű, mind hidrogénkötés nélküli konformerek is jelen vannak nemesgázmátrixban, a konkrét (például az oldallánc térállásában eltérő) konformereket azonban sem sikerült beazonosítani. Korábbi kvantumkémiai számításokból rendelkezésünkre álltak a mátrixban még elvileg látható konformerekre vonatkozó geometriai adatok. Munkám során ezekre a konformerekre számítottam ki B3LYP módszerrel az elméleti frekvenciákat, majd SQM módszerrel skáláztam azokat, hogy megkapjam az Ar-mátrixban várható frekvenciáikat. A konformerek azonosítását ezekre a számítási adatokra alapoztam.

Szelektív lézerbesugárzás alkalmazásával sikerült egyértelműen azonosítanom a ciszteinnek két nem-hidrogénkötött konformerét, valamint kizárni a harmadik, alacsony energiájú nem-hidrogénkötött konformer jelenlétét. A hidrogénkötött konformerek közül nagy valószínűséggel sikerült azonosítani a két legalacsonyabb energiájú konformert. A méréseim során kapott eredmények konzisztensek a más technikákkal, például mikrohullámú spektroszkópiával kapott eredményekkel.

Reményeim szerint munkám egy kis molekula, a cisztein, esetében segít feltérképezni a kísérletileg észlelhető konformereloszlást, ami értékes információt nyújt az elmélet és a kísérlet közötti esetleges eltérések további vizsgálatához. Biológiai érdekesebb nagyobb rendszereken (pl. peptidek, fehérjék) végzett vizsgálatokat is csak akkor érthetünk meg alaposan, ha a kismolekulákra (akár a nagy biomolekulák építőköveire) vonatkozó eredményeket már tökéletesen meg tudjuk magyarázni.