

# Makromolekulák konformációjának követése kisszögű röntgenszórás alapján

Wacha András, IV. évf., BME TTK

Témavezetők: **Dr. Bóta Attila** egyetemi docens  
BME Fizikai Kémia Tanszék  
**Varga Zoltán** Ph.D. hallgató  
BME Fizikai Kémia Tanszék

Az anyagtudomány újabb és újabb típusú makromolekulákat hoz létre, amelyek sajátos tulajdonságaik révén sokféle területen hasznosíthatók. Építőköveik sajátos, a környezeti paraméterek által megkívánt módon kapcsolódnak össze, és határozzák meg magának a makromolekulának a felhasználás szempontjából döntően fontos alakját (konformációját).

Izotróp gömbök felhasználásával, megfelelő építkezési szabályok betartásával változatos konformációjú szerkezeteket hozhatunk létre. Ezek a formák mosószerek, műanyagok, aktív biomolekulák elektronszerkezetének közelítésére alkalmasak.

A makromolekulák és aggregátumaik lineáris mérete az 1-100 nm-es tartományba esik. Emiatt vizsgálatukra a kisszögű szórási módszerek terjedtek el. A nyert szórási görbék azonban sok esetben nem egyértelműek.

Munkám első részében különböző (láncszerű, síkszerű, kompakt) konfigurációjú alakzatokat építettem fel 10-20 gömb felhasználásával, majd ezeket építőkövekként használva nagyobb aggregátumokat raktam össze. Az így fölépített egységek elméleti szórását számítva lehetőség nyílik a szerkezeti jellemzők (térfeltöltés, fraktáldimenzió és a szórási görbe korrelációjának vizsgálatára.

A szórási görbe szimulációja lehetőséget ad arra is, hogy a valóságos mérések adatait értelmezhessek: ha ugyanis kézzel tudjuk tartani a minta épülését, izolálni tudjuk a különböző hatásokat, melyek a szórási görbe lefutását befolyásolják. A szimulált szerkezet alakításaival pedig a szimulált szórási görbe fedésbe hozható a mérési görbével, azaz a minta szerkezete rekonstruálható.

## Hivatkozások:

- [1] D. I. Svergun, M. V. Petoukhov, *Determination of Domain Structure of Proteins from X-Ray Solution Scattering*, Biophysical Journal, **80**, 2946-2953 (2001)
- [2] S. Kirkpatrick, C. D. Gelatt, M. P. Vecchi, *Optimization by Simulated Annealing*, Science, **4598**, 671-680 (1983)