

A bírálóbizottság értékelése

Bokor Mónika MTA doktori értekezésében széles jelű NMR spektroszkópai módszerekkel vizsgálta a rendezett és rendezetlen fehérjék vízzel való kölcsönhatásának egyes részleteit, tanulmányozta a hidratáltság mértékét és formáit, megkülönböztette a rendezett és rendezetlen fehérjéket, továbbá meghatározta a vízzel való kölcsönhatás energetikai paramétereit. Eredményeit 11 tézispontban foglalta össze, amelyek mindegyikét mindhárom bíráló és a bírálóbizottság is elfogadta, a doktori mű új tudományos eredményei összefoglalva a következők:

A jelölt munkája során vizsgálati módszert dolgozott ki vízmolekulák olvadásának érzékelésére, jellemezte a lefagyasztott oldat melegítése során a megolvadó, különböző állapotú kötött vízmolekulákat, amelyek lehetővé tették a másodlagos és harmadlagos fehérje szerkezetek leírását.

Elvégezte mutáns α -szinuklein monomerek és oligomerek, amiloidok, a stabilin-2, valamint a β_4 T-stabilin-2 CTD komplex olvadási diagramok értelmezését és meghatározta a mozgékony hidratációs víz létesítette kötések számát. Megállapította, hogy az oligomerek, amiloidok és az 1:1 komplex olvadási görbéi nem egyenlők az alkotó fehérjék egyedi olvadási diagramjainak összegével.

Az olvadási diagram alapján megkülönböztette a Van der Waals típusú kölcsönhatásokat a hidrogénkötésektől. Kimutatta, hogy az α -szinuklein monomerekben a legkisebb hőmérsékleteken megjelenő, vízmolekula hányad a monomerek esetében a lehetséges összes hidrogénkötést megmutatja. Az amiloidszálak belsejében az NMR rejtett vízmolekulákat mutatott ki, míg az oligomerek esetében a fehérje oldalláncok korlátozott mozgékonyására lehet következtetni.

A mért olvadási diagramok alapján kimutatta, hogy az α -szinuklein oligomerek felszíne általában a méretüktől függetlenül alapvetően egységes és az irodalomban leírtakkal ellentétben a megfelelő olvadási diagramszakaszon nem azonosíthatók különböző méretű α -szinuklein oligomerek.

Kiderítette, hogy az oligomerek és amiloidok képződésekor a hidrofíl aminosavak jelentős része β -redőket alkot és a víz számára hozzáférhetetlenné válik.

Igazolta, hogy az α -szinuklein amiloidok központi hidrofób, β -redőket alkotó szakaszai rendezettek, ezzel szemben vízzel kölcsönhatás kialakítására képes végszegmensei rendezetlenek.

Igazolta β_4 T-stabilin-2 CTD komplex kialakulását a komponensekben és a komplexben lévő mozgékony hidratációs víz mennyiségének mérése alapján. Meghatározta az 1:1 komplexet felépítő fehérjemolekulák közti kötések számát, az 1:1 komplexet hidratáló vízmolekulák mozgékonyá válásának potenciálgátját, ami alapján megállapította, hogy a komplexben nincsenek az egyes aminosav láncoknak nem aktív hidrogénkötőhelyei. A heterogén energiaeloszlással kötő határfelület arányának növekedése alapján igazolta, hogy a kialakuló komplex „fuzzy” (bolyhos felszínű).