

HEGEDŰS TAMÁS



Semmelweis Egyetem
Általános Orvostudományi Kar
Biofizikai és Sugárbiológiai Intézet

Cím: 1094 Budapest, Tűzoltó u. 37-47.

KUTATÁSI TERÜLET BEMUTATÁSA

Kutatásunk célpontjában transzmembránfehérjék állnak, amelyekhez számos betegség köthető, s az elérhető gyógyszerek többsége is ilyen fehérjéken hat. Célzottan olyan ABC fehérjéket vizsgálunk, amelyek multidrog transzporterként működve a sejteket megvédik mérgező anyagoktól. Elméleti módszereket alkalmazunk működésük és szubsztrátfelismerésük megértésének érdekében. Vizsgáljuk továbbá, hogy a CFTR/ABCC7 kloridcsatorna mutációi, amelyek súlyos cisztás fibrózis betegséget okoznak, hogyan befolyásolják a fehérje feltekeredését, dinamikáját és működését. A csatorna nyitáshoz szükséges a rendezetlen regulátoros régió foszforilációja. E szabályozó folyamatok megértésének és modulálásának érdekében a rendezetlen régió intramolekuláris kölcsönhatásait meghatározzuk, és fehérjemérnökséggel kötő-fehérjét tervezünk. Hasonló módszerekkel olyan kisméretű fehérjét is tervezünk, amely erősen kötődik a SARS Cov-2 Envelope transzmembrán fehérje C-végéhez, ezzel gátolva az emberi Pals1 fehérjéhez való kötődést, így a sejt-sejt kapcsolatok leépülését és gyulladás kialakulását is.

ELSAJTÍTHATÓ TECHNIKÁK

Bioinformatika, 3D-bioinformatika, AlphaFold2, számítástechnika, molekula dinamika, High Performance Computing, Python, web-alkalmazás fejlesztés, molekuláris biológia, fehérje termeltetés és tisztítás, biokémiai módszerek, fluoreszcens mikroszkópiás technikák, atomerő mikroszkópia.

VÁLOGATOTT KÖZLEMÉNYEK

Hegedűs, T., Geisler, M., Lukács, G.L., Farkas, B. (2022) Ins and Outs of AlphaFold2 Transmembrane Protein Structure Predictions. *Cell Mol Life Sci* **79**: 73.

Nagy, T., Tóth, Á., Telbisz, Á., Sarkadi, B., Tordai, H., Tordai, A., **Hegedűs, T.** (2021) The Transport Pathway in the ABCG2 Protein and Its Regulation Revealed by Molecular Dynamics Simulations. *Cell Mol Life Sci* **78**: 2329–2339.

Csizmadia, G., Erdős, G., Tordai, H., Padányi, R., Tosatto, S., Dosztányi, Z., **Hegedűs, T.** (2020) The MemMoRF Database for Recognizing Disordered Protein Regions Interacting with Cellular Membranes. *Nucleic Acids Res* **49**: D355–D360.

Veit, G., Avramescu, R., Perdomo, D., Phuan, P., Bagdany, M., Apaja, P., Borot, F., Szollosi, D., Wu, Y., Finkbeiner, W., **Hegedus, T.**, Verkman, A., és Lukacs, G. (2014) Some Gating Potentiators, Including VX-770, Diminish Δ F508-CFTR Functional Expression. *Sci Transl Med* **6**: 246ra97.