

## **Kutatási összefoglaló a „Aktiváció és konformációváltás: az antitrombin III és a véralvadás XIII-as faktorának "A" alegysége” OTKA pályázathoz**

A pályázat keretében a XIII-as véralvadási faktor aktivációjának tekintetében vizsgálatra került a cisztein proteázok elemi enzimechanizmusa, hibrid kvantummechanikai/molekulamechanikai-molekuladinamikai módszerekkel a papain enzim példáján (Phys. Chem. Chem. Phys., 2016,18, 32847-32861; doi 10.1039/C6CP06869C), valamint a natív szubsztrát XIII-A általi hasításának vizsgálata is (J. Phys. Chem. B 2019, 123, 18, 3887–3897; doi 10.1021/acs.jpcc.9b00542). Vizsgáltuk a kalcium ionok által indukált aktivációt és konformációs változásokat is (J. Biomol. Struct. and Dyn.,2020, 38:1, 152-167, doi: 10.1080/07391102.2019.1574604). Végül a vállaltakkal összhangban vizsgáltuk az antithrombin III kölcsönhatását pentaszaccharid szubsztráttal (J. Biomol. Struct. and Dyn., 2019, 38:16, 4718-4732, doi: 10.1080/07391102.2019.1688194).

In the project, we have studied the cysteine proteases' enzyme mechanism with hybrid quantum mechanics/molecular mechanics-molecular dynamics methods in the aspect on the papain enzyme (Phys. Chem. Chem. Phys., 2016,18, 32847-32861; doi 10.1039/C6CP06869C) and the cleavage of native substrate by XIII-A (J. Phys. Chem. B 2019, 123, 18, 3887–3897; doi 10.1021/acs.jpcc.9b00542) as well. We also investigated the activation and conformational activation of factor XIII by Ca<sup>2+</sup> ions (J. Biomol. Struct. and Dyn.,2020, 38:1, 152-167, doi: 10.1080/07391102.2019.1574604). Lastly we have studied the interaction of Antithrombin III with pentasaccharide substrate (J. Biomol. Struct. and Dyn., 2019, 38:16, 4718-4732, doi: 10.1080/07391102.2019.1688194).