



1. PREDMET: METODE DOLOČEVANJA 3-DIMENZIONALNIH STRUKTUR MAKROMOLEKUL

Šifra: 30-1017

Število kreditnih točk (ECTS): 5,0

Obseg ur: 60; predavanja 60, vaje 0, seminarji 0

Program: univerzitetni študijski program Biokemija

2. VZGOJNOIZOBRAŽEVALNI CILJI

V okviru predmeta bo študent seznanjen z rentgensko kristalografijo in nuklearno magnetno resonanco, dvema osnovnima metodama določevanja struktur makromolekul in njihovih agregatov, in bo znal oceniti uporabnost, ki jih strukture določene s tema metodama ponujajo.

3. VSEBINA

Makromolekularna kristalografija

Viri rentgenskega žarčenja, tehnike kristalizacije, simetrija (točkovne in prostorske skupine), osnovna celica, sipanje rentgenskih žarkov, atomski sipni faktor, strukturni faktor, elektronska gostota.

Metode reševanja faznega problema: molekularna izmenjava, uporaba derivatov težkih atomov (MIR, MAD), modifikacije elektronske gostote.

Interpretacija elektronske gostote - graditev molekularnega modela.

Usklajevanje molekularnega modela z eksperimentalnimi podatki (piljenje), strukturna analiza.

Nuklearna magnetna resonanca

Teoretične osnove NMR: opis razvoja magnetizacije, produkt operatorji, elementi pulznih zaporedij.

NMR spektrometer: osnovni sestavni deli in delovanje.

Procesiranje in interpretacija NMR spektrov.

Dvodimenzionalni NMR eksperimenti.

Trodimenzionalni NMR eksperimenti s tremi resonancami.

Strategija asignacije spektrov proteinov in nukleinskih kislin.

Analiza sekundarne strukture.

Računanje 3D strukture iz NMR podatkov.

Molekularno gibanje.

Relaksacija.

Elektronska mikroskopija

Molekularno modeliranje

Nadgradnja eksperimentalnih metod, ki s pomočjo teoretičnega znanja in eksperimentalnih rezultatov skuša napovedati strukturo še nepoznanih makromolekul in njihovih kompleksov z makro in malimi molekulami.

4. POVEZANOST Z DRUGIMI PREDMETI

Predmet je povezan in hkrati dopolnjuje zlasti naslednje predmete: Spektroskopske metode, Struktura proteinov, Struktura atomov in molekul in Biokemija.

5. ŠTUDIJSKA LITERATURA

OSNOVNA UČBENIKA:

- Evans, J. N. S. *Biomolecular NMR Spectroscopy*. Oxford University Press, 1995.
- Blow, D. *Outline of Crystallography for Biologists*. Oxford University Press, 2002.

DODATNA LITERATURA:

- Levitt, M. H. *Spin Dynamics-Basics of Nuclear Magnetic Resonance*. John Wiley & Sons, 2001.
- Cavanagh, J. et al. *Protein NMR Spectroscopy: Principles and Practice*. Academic Press, 1996.
- Drenth, J. *Principles of Protein X-ray Crystallography*. Springer, 2002.
- McRee, D. *Practical Protein Crystallography*. Academic Press, 1997.
- Stout, G. H. in Jensen, L. H. *X-ray Structure Determination*. John Wiley & Sons, 1987.

6. OBVEZNOSTI ŠTUDENTA

Pisni in ustni izpit.

PRIPRAVILA: Janez Plavec in Kristina Djinović Carugo

DATUM: 29. 08. 2003