



---

## 1. PREDMET: METODE DOLOČEVANJA 3-DIMENZIONALNIH STRUKTUR MAKROMOLEKUL - vaje

---

Šifra: 30-1020

Število kreditnih točk (ECTS): 3,0

Obseg ur: 30; predavanja 0, vaje 30, seminarji 0

Program: univerzitetni študijski program Biokemija

---

## 2. VZGOJNOIZOBRAŽEVALNI CILJI

---

V okviru predmeta bo študent seznanjen s praktičnimi postopki pri uporabi nuklearne magnetne resonance in rentgenske difrakcije kot osnovnima metodama za določevanje struktur makromolekul in njihovih kompleksov.

---

## 3. VSEBINA

---

### **Nuklearna magnetna resonanca**

Sestavni deli NMR spektrometra, delo na spektrometru.

Postopki pri zajemanju NMR podatkov – kritični parametri v posameznih eno- in večdimenzionalnih eksperimentih in njihova optimizacija.

Procesiranje in interpretacija NMR spektrov.

Asignacija spektrov proteinov in nukleinskih kislin.

### **Makromolekularna kristalografija**

Inštrument za snemanje difrakcijskih podatkov: rotirajoča anoda, IP, CCD.

Kristalizacija proteinov – tehnika viseče kapljice, ogled različnih kristalizacijskih eksperimentov.

Snemanje difrakcijskih podatkov pri 100 K na rotirajoči anodi.

Po možnosti ogled sinhrotrona v Trstu, ogled linije za difrakcijo in laboratorija za strukturno biologijo.

Račun elektronske gostote in gradnja 3D modela v elektronsko gostoto, piljenje in strukturna analiza.

### **Molekularno modeliranje**

Eksperimentalne strukturne omejitve in optimizacija 3D struktur.

Vizualizacija in analiza 3D struktur.

---

## 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:

- Braun, S. et al. *150 and More Basic NMR Experiments*. Wiley-VCH, 1998.
- Blow, D. *Outline of Crystallography for Biologists*. Oxford University Press, 2002.

### DODATNA LITERATURA:

- Clardige, T. D. W. *High-resolution NMR Techniques in Organic Chemistry*. Pergamon, 1999.
- 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

---

Eksperimentalne in demonstracijske vaje, seminar iz literature in ustni izpit.

**PRIPRAVILA:** Janez Plavec in Kristina Djinović Carugo

**DATUM:** 15. 09. 2003