

# Fehérjék térszerkezetvizsgálata röntgendiffrakció, CD-, IR- és NMR-spektroszkópiai módszerekkel.

*FÉLÉVES ELŐADÁS TERVEZET*  
(heti 2 óra, 2 kredit pont)

Böcskey Zsolt és Perczel András

Az **atomi szintű szerkezetkutatás** különböző módszerei, komplex módon egészítik ki egymást és olyan viszonylag új kutatási területek fejlődését határozza meg, mint a biotechnológia számos ága, a szerkezeti biokémia, a molekuláris biológia vagy akár a virológia.

A kurzus, amely korábbi spektroszkópiai, peptid- vagy fehérjekémiai ismereteket nem feltételez, célul tűzi ki az alábbiak ismertetését:

## **Tematika:**

A röntgensugarak kristályokon való szóródásának elmélete,

- a fázisprobléma megoldása,
- a szerkezetfinomítás és validálása.

A 2D- és nD- NMR mérések alapfogalmai:

- 2D-NMR pulzusok (COSY, RELAY, TOCSY, NOESY, HSQC etc.),
- 3D-NMR pulzusok (NHCA, HSQC-NOESY, HSQC-TOCSY, CBCACONH),
- adatgyűjtés és feldolgozás.
- Az asszignáció és a fehérjék szerkezet-számolása távolság típusú kényszerfeltételek alapján.

CD és IR spektrumok alkalmazása kvalitatív és kvantitatív módon.

## **valamint**

számos ígéretes alkalmazás bemutatása a gyógyszertervezésben.

segédanyag:

*Perczel, A., Lacczkó I. és Hollósi M.*  
*„PEPTIDEK TÉRSZERKEZET-VIZSGÁLATA” c. könyv*  
*(Akadémiai Kiadó, Budapest, 1994)*

érdeklődni folyamatosan lehet a: „perczel@para.chem.elte.hu” címen