

PEPTIDEK TÉRSZERKEZET-VIZSGÁLATA

FÉLÉVES ELŐADÁS TERVEZET

(heti 2 óra, 2 kredit pont)

Perczel András (209-0555/1653)
(perczel@para.chem.elte.hu)

A kurzus, amely korábbi spektroszkópai vagy peptidkémiai ismereteket nem feltételez, célul tűzi ki az alábbiak ismertetését:

Tematika:

1. A peptidkonformáció fogalma és leírása.
2. Polipeptidek cirkuláris dikroizmus (CD) spektroszkópai vizsgálata.
 - 2.1. A peptid kromofor kiralitása.
 - 2.2. Térszerkezeti hatások és a másodlagos szerkezeti típusok (konformációk) CD-spektruma:
 - 2.2.1. - az α -hélix,
 - 2.2.2. - a β -redőzött réteg (β -konformáció),
 - 2.2.3. - a β -turn szerkezetek (β -kanyarok),
 - 2.2.4. - a poli(prolin)-II hélixek,
 - 2.2.5. - az aperiodikus (rendezetlen) konformáció.
 - 2.3. Az aromás és diszulfid kromoforok optikai aktivitása.
 - 2.4. A másodlagos szerkezet meghatározása a CD-spektrum alapján.
 - 2.5. Kvalitatív és kvantitatív CD-spektrum kiértékelés:
 - 2.5.1. - a regressziós közelítésmód,
 - 2.5.2. - spektrumok dekonvolúciója.
3. Polipeptidek térszerkezetének vizsgálata Fourier-transzformációs infravörös spektroszkópia segítségével.
 - 3.1. Az FTIR módszer főbb alkalmazási területei:
 - 3.1.1. - fehérjék és peptidok kölcsönhatása micellákkal,
 - 3.1.2. - fehérjék és peptidok oldalban kialakult konformációjának vizsgálata,
 - 3.1.3. - a β -turn szerkezetek FTIR-spektroszkópai azonosítása.
 - 3.2. A vibrációs cirkuláris dikroizmus (VCD) spektroszkópia.

4. Peptidek konformációanalízise NMR-spektroszkópia segítségével.
 - 4.1. Konformációanalízis nukleáris Overhauser effektus (NOE) módszerek segítségével.
 - 4.1.1. Peptidek jellegzetes ^1H - ^1H távolságai.
 - 4.1.2. Peptidek kvalitatív és kvantitatív konformációanalízise NOE módszerek segítségével.
 - 4.1.3. Kis peptidekben megfigyelt konformációs specifikus ^1H - ^1H távolságok:
 - 4.1.3.1. - gerinckonformáció meghatározása szekvenciális (rövid távú) NOE-k alapján,
 - 4.1.3.2. - gerinckonformáció meghatározása nem-szekvenciális (távoli) NOE-k alapján,
 - 4.1.3.2.1. - β -Kanyarok,
 - 4.1.3.2.2. - α -Hélix,
 - 4.1.3.2.3. - a β -redőzött réteg és nyújtott szerkezet.
 - 4.2. Peptidkonformáció meghatározása csatolási állandókból.
 - 4.3. Peptidkonformáció az amidprotonok kémiai eltolódásának tükrében.
 5. Peptidek konformációanalízise a röntgenkristallográfiával.
 - 5.1. Peptidek szilárd fázisú szerkezete.
 - 5.2. Fehérjék térszerkezete a peptidkonformációk alapján.
 6. Elméleti módszerek.
 - 6.1. Szélsőérték-keresési eljárások:
 - 6.1.1. - a többdimenziós konformációanalízis,
 - 6.1.2. - szélsőérték-meghatározó algoritmusok.
 - 6.2. Energiafüggvények.
 - 6.3. Di- és tripeptidek konformációanalízise:
 - 6.3.1. - peptidkonformációk molekuláris mechanika, valamint félempirikus módszerek alapján,
 - 6.3.2. - peptidtérszerkezetek *ab initio* számítása.
 - 6.4. Hosszabb peptidláncok konformációs lehetőségei.
 7. Peptidek térszerkezet-vizsgálata spektroszkópai és számítástechnikai módszerek együttes alkalmazásával.
 8. Néhány irodalmi példa ismertetése és kritikai jellegű összehasonlítása.

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