

# Pulzusszekvenciák az NMR szerkezetvizsgálatban

*FÉLÉVES ELŐADÁS TERVEZET*

*(heti 2 óra, 2 kredit pont)*

Perczel András (209-0555/1653)

(perczel@para.chem.elte.hu)

A 90-es évek elején a modern NMR területén tett felfedezéseiért Richard R. Ernstnek ítelték a kémiai Nobel-díjat. Napjainkra a 12-16 T mágneses térerejű készülékek lehetőséget nyújtanak a 20 kD-nál nem nagyobb tömegű fehérjék oldatfázisú konformerjeinek rutinszerű meghatározására. Az **atomi szintű szerkezetkutatás** különböző módszerei, komplex módon egészítik ki egymást. Az NMR 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 NMR ismereteket nem feltételez, célul tűzi ki az alábbiak ismertetését:

## **Tematika:**

Bevezető gondolatok az NMR-spektroszkópiába

Az NMR-spektroszkópia alapfogalmai és az 1D-spektrum.

- minta előkészítés
- kalibrálás és mérés
- adatfeldolgozás

A 2D- és nD- mérések alapfogalmai

- 2D- és nD-NMR pulzusok
- adatgyűjtés
- feldolgozás

A szorzatoperátor elmélete a gyakorlatban

- építőkövek (ECHOES, INEPT, stb.)
- hasznos 2D mérések
  - COSY, DQF-COSY, RELAY, TOCSY
  - HMQC, HSQC
- hasznos 3D- és nD- mérések
  - NHCA, HSQC-NOESY, HSQC-TOCSY, CBCACONH

Az asszignáció

Fehérjék szerkezet-számolása távolság típusú kényszerfeltételek alapján

Fehérjék NMR szerkezetének finomítása

## *segédanyag:*

A kurzus során oktatott anyag jelentős része megtekinthető a

„<http://www2.chem.elte.hu/protein/ENG/courses>” cím alatt.

valamint

*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