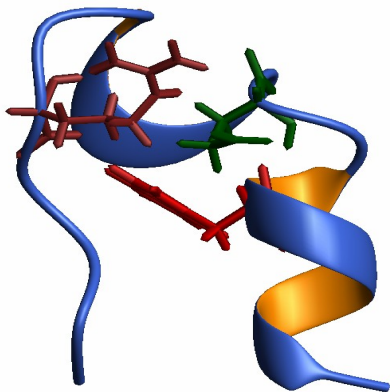


## Fehérjék és peptidok térszerkezetvizsgálata spektroszkópai módszerekkel

ETR-kód: kvvn9781, Kredit érték: 2



### 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  $\alpha$ -hélix,
    - 2.2.2. - a  $\beta$ -redőzött réteg ( $\beta$ -konformáció),
    - 2.2.3. - a  $\beta$ -turn szerkezetek ( $\beta$ -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  $\beta$ -kanyar 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  $^1\text{H}$ - $^1\text{H}$  távolságai.
    - 4.1.2. Peptidek kvalitatív és kvantitatív konformációanalízise NOE módszerek segítségével.
      - 4.1.3. Kis peptidekben megfigyelt konformációs-specifikus  $^1\text{H}$ - $^1\text{H}$  távolságok:
        - 4.1.3.1. gerinckonformáció meghatározása szekvenciális (rövid) NOE-k alapján,
        - 4.1.3.2. gerinckonformáció meghatározása nem-szekvenciális NOE-k alapján,  $\beta$ -Kanyarok, -  $\alpha$ -Hélix, a  $\beta$ -redőzött réteg és nyújtott szerkezet.
    - 4.2. Peptidkonformáció meghatározása csatolási állandókból.

- 4.3. Peptidkonformáció az amidprotonok kémiai eltolódásának tükrében.
5. Elméleti módszerek.
  - 5.1. Szélsőérték-keresési eljárások:
    - 5.1.1. - a többdimenziós konformációanalízis,
    - 5.1.2. - szélsőérték-meghatározó algoritmusok.
  - 5.2. Energiafüggvények.
  - 5.3. Di- és tripeptidek konformációanalízise:
    - 5.3.1. - peptidkonformációk molekuláris mechanika és félempirikus módszerek alapján,
    - 5.3.2. - peptidtérszerkezetek *ab initio* számítása.
  - 5.4. Hosszabb peptidláncok konformációs lehetőségei.
6. Peptidek térszerkezet-vizsgálata spektroszkópiai és számítástechnikai módszerek együttes alkalmazásával.
7. 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)