

A tantárgy neve:	magyarul:	Térszerkezet meghatározás NMR spektroszkópiával						Kódja:	TTKME0507	
	angolul:	NMR structure determination								
A képzés őszi félévei										
Felelős oktatási egység:		DE TTK, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék								
Kötelező előtanulmány neve:								Kódja:		
Típus		Heti óraszámok						Követelmény	Kredit	Oktatás nyelve
		Előadás		Gyakorlat		Labor				
Nappali	X	Heti	1	Heti	0	Heti	1	Kollokvium	3	magyar
Levelező		Féléves		Féléves		Féléves				
Tantárgyfelelős oktató		neve:		Dr. Fehér Krisztina				beosztása:	tudományos munkatárs	
<p>A kurzus célja, hogy megismerjék az NMR alapú szerkezet meghatározás alapelveit, lehetőségeit és korlátait. A kurzus során a hallgatók bevezetést kapnak a molekula mechanikába, amelyek az NMR alapú szerkezet meghatározás alapját képezik.</p> <p>Tanulás eredmények, kompetenciák: a hallgató</p> <p><i>Tudás:</i></p> <p>Ismerje a molekula mechanika alapvető elveit és az itt használt fontosabb fogalmakat. Ismerje az szerkezetmeghatározás általános és globális kérdéseit és problémáit. Ismerje a NMR alapú szerkezetmeghatározás során alkalmazott algoritmusok elvét és lényegét. Ismerje a NMR alapú szerkezetmeghatározással létrehozott szerkezeti sokaság felhasználhatóságának lehetőségeit és korlátozó tényezőit.</p> <p><i>Képesség:</i></p> <p>Képes a megfelelő szerkezet meghatározási stratégia kiválasztására. Képes NMR alapú szerkezet meghatározási módszerek elméletének gyakorlati alkalmazására. Érti az NMR paraméterek és a molekula szerkezet közötti összefüggéseket. Képes az NMR szerkezet meghatározással kapcsolatos szakirodalom kritikai értékelésére és a leírt módszerek adaptálására.</p> <p><i>Attitűd:</i></p> <p>Törekedjen az NMR alapú szerkezet meghatározás lehetőségeinek, korlátainak és alkalmazási területeinek minél teljesebb megismerésére. Törekedjen arra, hogy a szerkezet meghatározással kapcsolatos tudását folyamatosan továbbfejlessze. Legyen tudatában az molekula mechanika alapú modellezés előnyeinek és korlátainak.</p> <p><i>Autonómia és felelősség:</i></p> <p>Nyitott a szerkezet meghatározással és szerkezet modellezéssel foglalkozó szakemberekkel való együttműködésre. Felelősséggel vizsgálja a szerkezeti problémákat és azokról véleményt alkot. Felelősséget vállal a szerkezet meghatározás során kapott eredményeiért. A NMR alapú szerkezet meghatározás témájú szakirodalom feldolgozását megfelelő iránymutatás mellett önállóan végzi.</p>										
A kurzus tartalma, témakörei										
<p>Molekula mechanika. Erőterek. Potenciális energia felület. Szimulációs módszerek. Geometria optimalizálás és energia minimalizálás. Molekula dinamika.</p> <p>Szerkezettel összefüggő NMR paraméterek. Mag-Overhauser effektus (NOE). Csatolási állandók. Hidrogén kötésekkel összefüggő NMR paraméterek. Maradék dipoláris csatolások. Paramágneses relaxációs effektusok. Szerkezeti paraméterek fehérjéken és peptideken.</p> <p>Távolság geometria. Molekula dinamika kényszer feltételekkel. Variable Target Function algoritmus. Kényszer feltételek implementálása. Szerkezet finomítás. Szerkezeti sokaság validálása. Szerkezeti statisztika.</p> <p>Dinamikus szerkezeti sokaságok modellezése.</p>										
Tervezett tanulási tevékenységek, tanítási módszerek										
Előadás, konzultáció.										

Értékelés

Kollokvium (szóbeli és írásbeli).

Az írásbeli vizsga dolgozat összeállítása az előadás anyagából történik, melynek eredményét az alábbiak szerint értékeljük:

Jeles: 90 %, jó: 80 %, közepes 60 %, elégséges: 50 %, 50 % alatt elégtelen

Kötelező olvasmány:

-

Ajánlott szakirodalom:

Andrew R. Leach: Molecular Modelling: Principles and Applications, 2nd Edition, 2001

Quincy Teng: Structural Biology - Practical NMR Applications

G.C.K. Roberts: NMR of Macromolecules A Practical Approach