

A tantárgy neve:	magyarul:	Térszerkezet meghatározás NMR spektroszkópiával	Kódja:	TTKME0507
	angolul:	NMR structure determination		

Heti bontott tematika	
1. hét	<p>Szerkezeti alapfogalmak: konformáció, szupramolekuláris szerkezet, konformációs sokaság - Boltzmann eloszlás, szerkezet és dinamika összefüggése A szerkezet meghatározás kísérleti módszerei. Szerkezet modellezés elméleti módszerei. Kvantum mechanika és molekula mechanikai alapjai és összehasonlítása.</p> <hr/> <p>TE: Ismeri a szerkezet leírására szolgáló alapfogalmakat. Fel tudja sorolni a szerkezet meghatározás kísérleti módszereit. Be tudja határolni a szerkezeti modellek lehetőségeit és korlátait. Ismeri a kvantummechanikai és a klasszikus molekula mechanikai számítások közötti különbséget, előnyeiket és korlátaikat.</p>
2. hét	<p>Molekula mechanika. Erőtér fogalmának bevezetése, tagjainak részletes leírása. Kötő és nem-kötő tagok, az egyes tagok funkciók formáinak leírása, jellemző erőállandók bemutatása.</p> <hr/> <p>TE: Ismeri az erőtér fogalmát és tagjait, be tudja őket sorolni kötő és nem-kötő tagok között.</p>
3. hét	<p>Paraméterek és atom típusok definíciója. Topológia. A molekula mechanika előnyei és korlátai. Gyakran használt erőterek és jellemzőik.</p> <hr/> <p>TE: Fel tudja sorolni adott molekulákhoz szükséges atom típusokat, tagokat és paramétereket. Meg tud nevezni erőtereket és felhasználási területüket.</p>
4. hét	<p>Potenciális energia felület és jellemzői. Potenciális energia felület feltérképezésére alkalmazott szimulációs módszerek. Geometria optimalizálás és energia minimalizálás.</p> <hr/> <p>TE: Definiálni tudja a potenciális energia felületet és jellemzőit. Fel tud sorolni különböző szimulációs módszereket. Ismeri különböző energia minimalizálási módszerek elvét, előnyeiket és korlátait.</p>
5. hét	<p>Molekula dinamika. Termodinamikai sokaságok. Magas hőmérsékletű molekula dinamika, szimulált hűtés.</p> <hr/> <p>TE: Ismeri a molekula dinamikai szimulációk elvét, előnyeiket és korlátait. Meg tud nevezni különböző termodinamikai sokaságokat. Le tudja írni a magas hőmérsékletű molekula dinamika és a szimulált hűtés menetét.</p>
6. hét	<p>Szerkezettel összefüggő NMR paraméterek. Mag-Overhauser Effektus vagy NOE.</p> <hr/> <p>TE: Ismeri Mag-Overhauser effektus eredetét, szerkezettel való összefüggését és befolyásoló tényezőit, mérési lehetőségeit.</p>
7. hét	<p>Csatolási állandók. Hidrogén kötésekkel összefüggő NMR paraméterek. Maradék dipoláris csatolások. Paramágneses relaxációs effektusok. Szerkezeti paraméterek fehérjéken és peptideken.</p> <hr/> <p>TE: Ismeri a csatolási állandók szerkezeti összefüggéseit. Meg tud nevezni NMR paramétereket, amelyek hidrogén kötésekkel hozhatók összefüggésbe. Ismeri a maradék dipoláris csatolások és paramágneses relaxációs effektusok eredetét, mérési lehetőségeit, szerkezettel való összefüggését.</p>
8. hét	<p>Az NMR szerkezet meghatározás lépései. Szerkezeti sokaság generálásának módszerei. Távoltság geometria. Molekula dinamika kényszer feltételekkel. Variable Target Function algoritmus.</p> <hr/> <p>TE: Fel tudja sorolni az NMR szerkezet meghatározás lépéseit. Ismeri a szerkezeti sokaság generálás módszereinek alapelveit.</p>
9. hét	<p>Kényszer feltételek implementálása. NOE kényszerfeltételek gyakorlati aspektusai. Szerkezet finomítás. Végleges szerkezeti sokaság kiválasztása és pontossága.</p> <hr/> <p>TE: Tisztában van a kényszer feltételek implementálásának gyakorlati kérdéseivel. Le tudja írni a szerkezet finomítás menetét és meg tudja nevezni célját. Alkalmazni tudja a szerkezeti sokaság kiválasztásának feltételeit.</p>
10. hét	<p>NMR szerkezet meghatározásra alkalmazott szoftverek. Szerkezeti sokaság validálása és az erre alkalmazott programok. Szerkezeti statisztika.</p> <hr/> <p>TE: Meg tud nevezni NMR szerkezet meghatározásra alkalmazott szoftvereket. Ismeri a szerkezeti sokaság validálásának célját és módszereit. Meg tud nevezni a szerkezeti sokaságot leíró statisztikát.</p>
11. hét	<p>Szerkezet és dinamika. A dinamika időskálája és hatásai az NMR szerkezeti paraméterekre. Dinamikus szerkezeti sokaságok modellezése.</p>

	TE: Meg tud nevezni különböző időskálájú dinamikai folyamatokat. Ismeri a dinamikus folyamatok az NMR szerkezeti paraméterekre való hatását.
12. hét	<p>Maganin peptid szerkezet meghatározásának bemutatása másodlagos szerkezetet indukáló oldószerben. Maganin TFE oldószerbeli ^1H NMR spektrumainak jel hozzárendelése homonukleáris 2D módszerekkel. Szerkezetszámolás és finomítás ARIA/CNS programokkal, szerkezet validálás és szerkezeti statisztika.</p> <p>TE: Ismeri a peptid NMR spektrumainak jellemzőit és hozzárendelésének alapelveit. Képes oligopeptid ^1H NMR spektrumának hozzárendelésére 2 dimenziós homonukleáris kísérletek segítségével.</p>
13. hét	<p>Másodlagos szerkezet nélküli Maganin peptid szerkezeti sokaságának modellezése vizes közegben. Maganin vizes közegű ^1H NMR spektrumainak jel hozzárendelése homonukleáris 2D módszerekkel. Explicit oldószer dobozos molekula dinamika számítása AMBER szimulációs programmal és a trajektóriák összehasonlítása NMR paraméterekkel.</p> <p>TE: Ismeri az klasszikus egyensúlyi molekula dinamika egyes lépéseit. Képes a molekula dinamikai trajektória analizésére az NMR paraméterek visszaszámolása és összehasonlítása által.</p>
14. hét	<p>Konzultációs óra.</p> <p>TE: A kurzus során szerzett ismeretek áttekintése, a felvetődött kérdések tisztázása.</p>