

A tantárgy neve:		magyarul:	Röntgendiffrakciós szerkezetvizsgálat					Kódja:	TKME0423	
		angolul:	Structure determination by X-ray diffraction							
Felelős oktatási egység:		DE TTK, Fizikai Kémiai Tanszék								
Kötelező előtanulmány neve:							Kódja:			
Típus		Heti óraszámok						Követelmény	Kredit	Oktatás nyelve
		Előadás		Gyakorlat		Labor				
Nappali	x	Heti	2	Heti	0	Heti	0	kollokvium	3	magyar
Levelező		Féléves		Féléves		Féléves				
Tantárgyfelelős oktató		neve:		Bényei Attila			beosztása:	Egyetemi docens		
A kurzus célja, hogy a hallgatók										
megismerjék a röntgendiffrakciós szerkezet-meghatározási módszer elméleti alapjait. Jártasságot szerezzenek számítógépes programok használatában. Ismerje a röntgendiffrakciós és a spektroszkópiai módszerek viszonyát, előnyeiket és hátrányaikat.										
Tanulás eredmények, kompetenciák: a hallgató										
<i>Tudás:</i>										
A hallgató olyan matematikai, fizikai, biokémiai és számítógépes ismereteket szerez, amelyek révén tájékozódni tud a röntgendiffrakciós módszerrel meghatározott adatok között. Az előadások az elmélet bemutatásán túlmenően számítógépes ismereteket is nyújtanak. A hallgató részletesen elemzett példák segítségével ismereteket szerez a kristallográfia mint módszer alkalmazhatóságáról kémiai, biokémiai, szerkezeti kutatások területén. Megismeri a kapcsolódó diszciplínák legújabb kutatási eredményeit, fejlődési irányait is. Érti a tudományos közleményekben szereplő röntgendiffrakciós eredmények jelentését.										
<i>Képesség:</i>										
Legyen tisztában a röntgensugárzás tulajdonságaival és a diffrakció jelenségének leírásával. Tudja elhelyezni és összehasonlítani a röntgendiffrakciós szerkezetvizsgáló módszert a szerkezetkutatás többi módszerével. Értse a szerkezet-meghatározás alapvető lépéseit. Legyen képes ismereteit felhasználni a vegyész mesterképzési szak speciális szakmai ismereteinek az elsajátításakor. Tudását képes alkalmazni a gyakorlatban, pl. számítógépes programok alkalmazásával a tantárgy tanulásakor megszerzett ismereteket. Képes röntgendiffrakciós adatbázisban (CSD és PDB) szerkezeteket és szerkezet részleteket keresni. Képes a röntgendiffrakciós adatok jóságát megállapítani. Képes tájékozódni a saját kutatási területén a röntgendiffrakciós módszer alkalmazhatóságát felmérni, a feltett szerkezeti kérdéseket egyszerű esetekben megválaszolni.										
<i>Attitűd:</i>										
A tantárgy elősegíti, hogy a hallgató, megfelelő és átfogó szerkezeti kémiai tudás, továbbá korszerű szemlélet birtokában a későbbi tanulmányai során és a végzés után az új szakmai információkat, kutatási eredményeket megfelelően értelmezni és értékelni tudja továbbá a természettudományos tudását folyamatosan gyarapítsa. A hallgató ennek köszönhetően szilárd elméleti alapokkal bír a diffrakciós módszer lényegéről, ami hozzásegíti ahhoz, hogy a szakmai feladatait pontosan, hatékonyan végezze. Fejleszti tudását, nyitott a műszeres szerkezetvizsgálati eredmények gyakorlati alkalmazására.										
<i>Autonómia és felelősség:</i>										
A kurzus hozzásegíti a hallgatót ahhoz, hogy munkájában innovatív és hatékony legyen, továbbá szakmai és nem szakmai körökben a biotechnológiai és természettudományos kérdésekben megalapozottan és felelősséggel formáljon véleményt. Az elméleti ismereteket önállóan bővíti.										
A kurzus tartalma, témakörei										
<ul style="list-style-type: none"> - A röntgensugárzás tulajdonságai, gyakorlati alkalmazások. A röntgensugárzás mint diffrakciós módszer, analógia a mikroszkópos képalkotással. A diffrakciós módszerek általában. - Szimmetria, nem kristallográfiai szimmetria, egykristályok, kristályrács, aszimmetrikus egység, elemi cella. - Egykristályok növelése, termodinamika és kinetika. A fehérjék kristályosításának nehézségei. - Diffrakciós detektorok típusai, diffraktométerek. A szinkrotron sugárzás, tulajdonságai, alkalmazhatósága, elérhetősége. A röntgen szabadelektron lézer. 										

- A szerkezet-meghatározás menete, adatgyűjtés, adat/paraméter arány,
- A fázisprobléma és megoldása. Szerkezet megoldó módszerek és programok. A nehéz atom módszer, a direkt módszer és a charge flipping. A szerkezet finomítása.
- A szerkezet-meghatározás eredménye: kötősszögek, kötéstávolságok. Fehérjék szerkezeti elemei, a peptid kötés, aminosavak, oldalláncok.
- A röntgendiffrakciós eredmények és szerkezetek publikálása. A CIF.
- Krisztallográfiai adatbázisok: CSD és PDB, internet, grafikus programok. Számolási gyakorlat, alapvető program funkciók használata.
- A szerkezetek validálása kis molekulák és fehérjék esetén.
- Enzimek működése molekuláris szinten. Esettanulmányok, a biomakromolekulák szerkezetének és működésének összefüggése példákon keresztül.

Tervezett tanulási tevékenységek, tanítási módszerek

Tizenegy előadás és három számolási gyakorlat, ez utóbbiak anyaga számítógépes programok használata. Példákon keresztül a legfrissebb kutatási eredmények feldolgozása és bemutatása

Értékelés

A félév során a hallgatók vizsgadolgozatot készíthetnek egy az előadóval egyeztetett témáról, ennek alapján jegymegajánlás történik. Emellett a vizsgajegy szóbeli vizsgán is megszerezhető.

A számítógépes programok használatában szerzett gyakorlat (20 %)

Aktív részvétel az előadásokon (50 %)

Egyéni munka, rövid beszámoló közlemények feldolgozásáról (legalább egy eset minden hallgatónak) (30 %)

Jeles: 90 %, jó: 75 %, közepes 60 %, elégséges: 50 %, 50 % alatt elégtelen

Hiányzás esetén a TVSZ-ben meghatározottak szerint kell eljárni.

Kötelező olvasmány:

1. Bényei Attila, Harmat Veronika (2013) Röntgendiffrakciós szerkezetvizsgálat (www.tankonyvtar.hu, elektronikus jegyzet)
http://www.tankonyvtar.hu/hu/tartalom/tamop412A/2011_0025_vegy_1/adatok.html

Ajánlott szakirodalom:

1. J. P. Glusker, K. N. Trueblood: Crystal Structure Analysis: a Primer (IUCR Texts on Crystallography)
2. <http://www.iucr.org/education/pamphlets>

Heti bontott tematika	
1. hét	<p>A röntgensugárzás. Tulajdonságai és gyakorlati alkalmazások. A diffrakciós módszerek általában. Az egykristály röntgendiffrakció helye a szerkezet-meghatározási módszerek között. Fourier transzformáció és jellemzői. Legkisebb négyzetek módszere.</p> <hr/> <p>TE: Ismeri a röntgen sugárzás tulajdonságait. Tájékozott a felületi szerkezetvizsgáló módszerek és a szilárd fázis teljes szerkezetét felderíteni képes módszerek között. Ismeri a Fourier transzformáció alapvető tulajdonságait és néhány alkalmazását.</p>
2. hét	<p>Szimmetria. A halmazok szerkezete, szilárd anyagok, kristályok, egykristályok, kristályrács, elemi cella, Miller indexek, szimmetria szimbólumok, szimmetria osztályok, krisztallográfiai szimmetriajelölés, szisztematikus hiányok, reciprok tér.</p> <hr/> <p>TE: Ismeri a kristályok szimmetria tulajdonságait. Elemi cella, aszimmetrikus egység, tércsoport fogalmát. Ismeri a szimmetria műveletek nemzetközi jelölését. Ismeri a valós és a reciprok tér fogalmát.</p>
3. hét	<p>Kristályok. Egykristályok növelése. Termodinamikai és kinetikai megfontolások, gyakorlati tanácsok. A neutron diffrakció elve és alkalmazásai. SAXS, EXAFS módszerek.</p> <hr/> <p>TE: Ismeri a kristályosítás mint tisztítási módszer jelentőségét. Jártassága van a kristályosítás leírásának termodinamikai és kinetikai kérdéseiben. Ismeri a neutron diffrakció alapjait és</p>

	alkalmazhatóságát, előnyeit és hátrányait.
4. hét	Gyakorlati foglalkozás. A CSD adatbázis megismerése. TE: Számítógépes gyakorlat keretében önállóan tud szerkezet részleteket keresni a CSD adatbázisban, a találatokat kiértékelni és az eredményeket rajzoló programokkal megjeleníteni.
5. hét	Módszerek. A röntgendiffrakciós módszerek fejlődése, detektorok típusai, fotográfiai módszerek. Pordiffrakció. Négykörös egykristály diffraktométerek, térbeli detektálás. TE: Ismeri a röntgendiffrakciós módszer fejlődésének tudománytörténeti állomásait. Ismeri a röntgendiffrakciós készülék főbb részeit. Tájékozott a források és detektorok főbb típusának működési elvében.
6. hét	A szerkezet-meghatározás menete. A röntgendiffrakciós szerkezet-meghatározás lépései. Elemi cella méreteinek és szimmetriájának meghatározása, adatgyűjtés, adat/paraméter arány, a szerkezet megoldása és finomítása. Az abszolút konfiguráció és meghatározása röntgendiffrakcióval. TE: Ismeri és érti a röntgendiffrakciós szerkezet-meghatározás lépéseit.
7. hét	Publikálás. A röntgendiffrakciós eredmények publikálása, elektronikus publikálás. A CIF. Az eredmények validálása. TE: Ismeri a röntgendiffrakciós vizsgálat publikálásának szabályait. Ismeri a CIF projekt lényegét és jelentőségét az eredmények egységes szempontok szerinti publikálásában. Az eredmények validálása kis molekulák esetén.
8. hét	A közlemények helyes olvasása. A röntgendiffrakciós szerkezet-meghatározás eredménye, jellemző kötésszögek és kötéstávolságok. Az atomok hőmozgásának hatásai, ORTEP. Statisztikai jellemzők. TE: Tájékozódni tud a kémiai folyóiratokban szereplő krisztallográfiai adatok és ábrák jelentésében.
9. hét	Számítógépes programok. A szerkezet-meghatározásban használatos számítógépes programok főbb jellemzői, WinGX, ShelX, ORTEP. TE: Ismer számítógépes programcsomagokat. A főbb funkciók használatával tisztában van.
10. hét	Gyakorlati foglalkozás. Az ORTEP és a MERCURY program használata. TE: A hallgatók mérőpárokból számítógépes programok használatával adatbázis lekérdezést valamint jellemző kötéstávolság és kötésszög adatok meghatározását végzik el.
11. hét	Polimorfizmus. Jelentősége a gyógyszergyártásban. TE: Ismeri a polimorfia jelentőségét, megjelenését a mindennapi életben. Polimorfia a gyógyszeriparban .
12. hét	A fehérjekrisztallográfia alapjai. A fázisprobléma megoldásának lehetőségei fehérjék esetén. Fehérje szerkezetek finomítása. A Ramachandran ábrázolás. Fehérjék működése. TE: Ismeri a fehérjék szerkezeti motívumait.
13. hét	Gyakorlati foglalkozás. Egy szerkezet-meghatározás elvégzése, gyakorlati munka. TE: A hallgatók tanári segítséggel egy teljes szerkezet-meghatározás lépéseit végzik el a WINGX programcsomag alkalmazásával
14. hét	A röntgendiffrakciós és más szerkezet-meghatározási módszerek viszonya. Kiralítás és röntgendiffrakció. Abszolút konfiguráció meghatározása. TE: Az egykristály röntgendiffrakció alkalmazásának korlátai. A diffrakciós és a spektroszkópiai módszerek viszonya. Ismeri az anomális szórás jelenségét és felhasználását az abszolút konfiguráció meghatározásában.