

Praktyczny kurs rentgenografii strukturalnej

Kod przedmiotu: 02-PKRF

Liczba punktów: 5

Rok studiów:

Semestr: letni

Liczba godz. wykładów: 15

Liczba godz. ćwiczeń: 0

Liczba godz. laboratoriów 30

Liczba godz. seminariów 0

Nazwisko prowadzącego: Maria Gdaniec, Mariusz Jaskólski, Szymon Krzywda, Agnieszka Janiak

Rodzaj zaliczenia: egzamin

Język:
Polski

Rodzaj przedmiotu:
fakultatywny

Poziom specjalizacji:
studia II stopnia

Treści merytoryczne: Wyznaczanie struktury kryształów związków małowcząsteczkowych i makromolekuł w oparciu o dane dyfrakcyjne dla monokryształu, w szczególności: metody krystalizacji, wybór kryształu i ocena jego jakości, pomiar dyfrakcji rentgenowskiej w warunkach kontrolowanej temperatury, rozwiązanie problemu fazowego i udokładnienie struktury. Ocena jakości modelu struktury i procedura deponowania wyników badań strukturalnych w światowych bazach danych. Absolutna struktura kryształu i cząsteczki. Interpretacja uzyskanych wyników w oparciu o obliczenia geometryczne i mapy gęstości elektronowej. Zastosowanie oprogramowania do obliczeń krystalograficznych i strukturalnych. Grafika molekularna. Wykorzystanie informacji z globalnych baz danych w chemii, biologii i medycynie. Nowoczesne projektowanie leków na bazie informacji strukturalnej.

Celem przedmiotu jest poznanie metod dyfrakcyjnych służących wyznaczaniu struktury ciał stałych, opanowanie umiejętności pozyskiwania informacji strukturalnej z innych źródeł oraz wykorzystania jej do rozwiązania określonego zagadnienia strukturalnego w chemii, biologii i medycynie. W szczególności celem jest: (a) zdobycie umiejętności postępowania z materiałem białkowym, jego prostej charakterystyki i krystalizacji; (b) zdobycie umiejętności przygotowania kryształu do badań rentgenograficznych; (c) poznanie oprogramowania do obliczeń krystalograficznych i do modelowania struktur biomolekuł; (d) poznanie metodyki racjonalnego projektowania nowoczesnych leków w oparciu o informację strukturalną (e) zdobycie umiejętności krytycznej oceny wyników doświadczalnych; (f) wykorzystanie informacji strukturalnej z baz danych dla rozwiązania określonego problemu strukturalnego.

Zalecana literatura:

1. Z.Bojarski, E.Łągiewka, "*Rentgenowska analiza strukturalna*", Wyd. UŚ, Katowice 1995
2. M. Jaskólski, *Krystalografia dla biologów*. Wydawnictwo Naukowe UAM, Poznań 2010.
3. W. Clegg, A.J. Blake, R.O. Gould, P. Main *Crystal Structure Analysis. Principles and Practice*, Oxford University Press, Oxford, 2001.
4. P. Luger, *Rentgenografia strukturalna monokryształów*, PWN, Warszawa, 1989
5. W. Massa, *Crystal Structure Determination*, Springer-Verlag, Berlin, 1999
6. Materiały dotyczące strukturalnych baz danych: <http://www.ccdc.cam.ac.uk> (CSD), <http://www.fiz-karlsruhe.de/icsd.html> (ICSD), <http://www.pdb.org/pdb/home/home.do>(PDB)

Wymagania wstępne: Posługiwanie się podstawowymi pojęciami związanymi z symetrią i siecią przestrzenną oraz symboliką Hermanna-Maugina; posługiwanie się podstawowymi pojęciami z zakresu stereochemii; znajomość podstaw zjawiska dyfrakcji na kryształach