

**Табела 5.1** Спецификација предмета на студијском програму Докторске студије биохемије (ДСБ)

<b>Назив предмета: РЕНДГЕНСКА СТРУКТУРНА АНАЛИЗА</b>		<b>Шифра предмета:</b>	ДСБ-633
<b>БИОМОЛЕКУЛА</b>			
<b>Наставник или наставници:</b> др Оливера Клисурић, редовни професор, др Марко Родић, доцент, др Едвард Петри, доцент			
<b>Статус предмета:</b> Изборни			
<b>Број ЕСПБ:</b> 15			
<b>Услов:</b> -			
<b>Циљ предмета:</b> Оспособљавање студента за одређивање структуре биомолекула кристалне структуре и њихову карактеризацију методама дифракције рендгенског зрачења.			
<b>Исход предмета:</b> Након одслушаног и наученог садржаја предмета студент треба да има развијене: <ul style="list-style-type: none"> <li>- Опште способности да: <ul style="list-style-type: none"> <li>- експериментално изведе одређивање структуре монокристалних узорака</li> <li>- изврши валидацију и интерпретацију резултата структурне анализе биомолекула</li> </ul> </li> <li>- Предметно-специфичне способности да: <ul style="list-style-type: none"> <li>- демонстрира продубљена знања о структури и симетрији кристала</li> </ul> </li> </ul>			
<b>Садржај предмета</b>			
<i>Теоријска настава</i>			
Кристализација малих молекула. Стратегије и технике кристализације протеина. Симетрија кристала. Кристални системи и просторне групе. Реципрочна решетка. Расејање рендгенског зрачења. Структурни фактор. Дифракција рендгенског зрачења на кристалу. Апсорпција рендгенског зрачења. Симетрија реципрочне решетке. Дифрактометар за монокристал. Прикупљање дифракционих података. Процена квалитета података и анализа. Корекција апсорпције. Одређивање кристалне структуре. Веза између дифракционе слике и структуре кристала (Фурије трансформ). Фазни проблем и методе решавања. Структурни модел и утачњавање. Валидација структурног модела. Кристалографски информациони фајл (CIF). Депоновање финалног структурног модела. Публикација и презентација резултата. Кристалографске банке података. Хетерологна експресија, пречишћавање и кристализација протеина. Решавање кристалне структуре протеина. Параметри квалитета кристалних структура протеина. Веза између структуре и функције протеина. Структурна биоинформатика и молекуларно моделовање.			
<i>Практична настава</i>			
Рад на аутоматском дифрактометру за монокристал. Редукција података. Рад са рачунарским програмима за решавање и утачњавање кристалних структура. Рад са проблематичним структурама (кристали близанци, неуређеност положаја). Рад са програмима за геометријску интерпретацију и валидацију података. Рад са програмима за претрагу Кембричке банке података. Комплетирање кристалографског информационог фајла и депоновање у Кембричку банку података. Презентација и дискусија резултата. Коришћење протеомских и биоинформатичких ресурса и програма за тродимензионалну макромолекуларну визуелизацију и анализу. Коришћење базе података структурне биологије (PDB, SWISS PROT, NCBI, BLAST,....). Студенти ће научити како да примењују методе структурне биологије протеина у својим истраживањима, укључујући: а) методе за визуелизације протеина, б) одређивање, моделовање и анализирање структуре протеина, в) предвиђање структуре протеина г) анализирање протенин-лиганд интеракције.			
<b>Препоручена литература</b>			
<ol style="list-style-type: none"> <li>1. B. Rupp, Biomolecular Crystallography, Garland Science, 2010</li> <li>2. W. Massa, Crystal Structure Determination, Springer, 2004</li> <li>3. Љиљана Карановић, Дејан Полети: Рендгенска структурна анализа, Завод за уџбенике и наставна средства, Београд 2003.</li> <li>4. W. Borchardt-Ott, Crystallography, Springer, 2011</li> <li>5. Y. Waseda, E. Matsubara, K. Shinoda, X-ray Diffraction Crystallography, Springer, 2011</li> <li>6. W. Clegg (ed.), Crystal Structure Analysis, Oxford University Press, 2009</li> <li>7. M. Ladd, R. Palmer, Structure Determination by X-ray Crystallography, Springer, 2013</li> <li>8. G.S. Girolami, X-ray Crystallography, University Science Books, 2016</li> <li>9. Serdyuk, I., Zaccai, N., Zaccai, J., <i>Methods in molecular biophysics: structure, dynamics, function</i>, 2010</li> </ol> Помоћна литература: <ol style="list-style-type: none"> <li>1. P. Luger, Modern X-ray Analysis on Single Crystals, 2nd ed, De Gruyter, 2013</li> <li>2. P. Muller (ed.), Crystal Structure Refinement, Oxford University Press, 2006</li> </ol>			
Број часова активне наставе	Теоријска настава:	Практична настава ():	
150 (75+75)	5 (75)	5 (75)	
<b>Методе извођења наставе</b>			
Предавања, израда и одбрана пројеката на одабрану тему, студијски истраживачки рад и консултације			
<b>Оцена знања (максимални број поена 100)</b>			
урађен и одбрањен пројекат на задату тему	50 поена	усмени испит	50 поена