

**Krystalograficzna analiza makrocząsteczek  
/wykład monograficzny (do wyboru)/**

**Uwaga: Studenci I i II stopnia studiów powinni wcześniej uzyskać zgodę Prodziekana ds. studenckich, dr hab. A. Skarżyńskiej**

wykładowca: dr hab. Katarzyna Ślepokura, dr A. Pyra (prof. dr hab. T. Lis)  
ćwiczenia laboratoryjne: dr hab. K. Ślepokura, dr A. Pyra, mgr S. Radwan  
30 godzin wykładu, 15 godzin ćwiczeń laboratoryjnych

**Uwaga: W zajęciach mogą uczestniczyć słuchacze studium doktoranckiego oraz studenci I i II stopnia studiów, którzy zaliczyli kurs podstawowy z krystalografii.**

Podstawowym celem zajęć jest przedstawienie technik pozwalających określić budowę makrocząsteczek oraz dużych cząsteczek związków organicznych przy zastosowaniu rentgenowskich metod dyfrakcyjnych. W ramach ćwiczeń każda osoba będzie mogła przeprowadzić pełne badania krystalograficzne nowego kryształu (własnego bądź dostarczonego przez prowadzącego zajęcia) kończące się publikacją. Warunkiem zaliczenia zajęć jest przedstawienie pracy, w której zostanie opisana badana struktura krystaliczna.

Omawiane będą następujące zagadnienia:

1. Metody krystalizacji makrocząsteczek (białek, kwasów nukleinowych, wirusów i innych tworów biologicznych).
2. Przygotowywanie kryształów do badań dyfrakcyjnych (umieszczanie kryształów w kapilarach, pomiary dyfrakcyjne w niskich temperaturach).
3. Pomiary dyfraktometryczne – pomiary z wykorzystaniem kamery CCD.
4. Szacowanie wielkości absorpcji i jej uwzględnianie.
5. Przygotowanie plików danych do obliczeń z wykorzystaniem programów krystalograficznych.
6. Rozwiązywanie struktury kryształu z wykorzystaniem metody Pattersona (podstawienie izomorficzne).
7. Rozwiązywanie struktury kryształu z wykorzystaniem metod bezpośrednich,
8. Udokładnianie struktury kryształu (więzy: constraints i restraints); kryształy nieuporządkowane.
9. Opis budowy cząsteczki i kryształu.
10. Wpływ drgań atomów na długości wiązań chemicznych wyznaczanych metodami dyfrakcyjnymi.
11. Wpływ temperatury i ciśnienia na długości wiązań chemicznych.
12. Struktura makrocząsteczek w kryształach i w roztworze.
13. Sposoby prezentacji informacji krystalograficznych (czasopisma, bazy danych).