

## **Primjena spektroskopije NMR u konformacijskoj analizi oligonukleotida DNK i njegovog kompleksa s ligandom**

*Dr. sc. Vilko Smrečki  
Institut Ruđer Bošković*

Spektroskopija NMR je važna metoda u analizi strukture makromolekula. Tako je čak 40% od ukupnog broja struktura nukleinskih kiselina pohranjenih u bazi podataka Protein Data Bank (PDB) riješeno uz pomoć spektroskopije NMR.

Nakon ukazivanja na različite informacije o strukturi DNK koje je moguće dobiti pomoću najkorištenijih tehnika spektroskopije NMR, fokus prezentacije usmjeren je na konformacijsku analizu skeleta DNK, odnosno diedarske kutove  $\beta$  i  $\epsilon$  u fosfatnim grupama koje je moguće odrediti iz konstanti sprege  $^3J(^1H3'-^{31}P)$ .

Za mjerenje konstanti sprege  $^3J(^1H3'-^{31}P)$  u oligomerima DNK predložena je tehnika razlike TOCSY s konstantnim vremenom (*engl.* CT-TOCSY difference) koja pokazuje trostruko povećanje osjetljivosti u odnosu na postojeću tehniku razlike CT-NOESY.

Pokazana je i primjena tehnika s konstantnim vremenom u analizi promjene diedarskih kutova  $\beta$  i  $\epsilon$  u modelnim oligomerima DNK te njihovim kompleksima s modelom porfirina.