**Уржумцев, Александр Георгиевич.
Использование смешанной атомной модели для улучшения наборов фаз структурных факторов при рентгеноструктурном исследовании макромолекул : диссертация ... кандидата физико-математических наук : 01.04.18. - Пущино, 1985. - 209 с. : ил.больше**

[**Цитаты из текста:**](https://search.rsl.ru/ru/search)

* **стр. 2**

**плотности. Принцип максимума определителя 1.5. Использование геометрической информации ... 1.6. Использование моделей молекулы 1.7. Комбинирование дополнительной информащш различных типов 1.8. Сравнение методов улучшения наборов фаз структурных факторов для макромолекул ГЛАВА 2. УЛУЧШЕНИЕ НАБОРОВ ФАЗ СТРУКТУРНЫХ ФАКТОРОВ ПУТЕМ ПОСТРОЕНИЯ И МОДИФИКАЦИИ ГРУБОЙ ЛИБО СМЕШАННОЙ...**

* **стр. 3**

**качества наборов фаз 4.5. Построение и анализ заключительного синтеза ГЛАВА 5. УТОЧНЕНИЕ НАБОРА ФАЗ ДЯЯ ^-КРЙСТАЛЛЙНА ШЬ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ СМЕШАННОЙ АТОШОЙ МОДЕЛИ ... 5.1. Описание частичной модели ; 5.2. Уточнение частичной модели 5.3. Использование смешанной атомной модели .... 5.4. Результат первого этапа улучшения набора фаз с помощью смешанной атомной модели...**

* **стр. 19**

**тангенс-формулу различных ве­ совых сомножителей [28-30] не гарантирует сходимость к пра­ вильному набору значений. 1.2.2. Использование тангенс-формулы для улучшения на­ боров фаз структурных факторов макромолекул. Улучшение наборов фаз структурных факторов с помощью тангенс-формулы, успешно применявшееся для исследования низкомолекулярных соединений ( см., например, [31]), исход­ но...**

**Оглавление диссертациикандидат физико-математических наук Уржумцев, Александр Георгиевич**

**ВВЕДЕНИЕ.**

**ГЛАВА I. МЕТО.Щ УЛУЧШЕНИЯ НАБОРОВ ФАЗ СТРУКТУРНЫХ ФАКТОРОВ ПРИ ИССЛЕДОВАНИИ МАКРОМОЛЕКУЛ (Литературный обзор) . II**

**1.1. Проблема улучшения наборов фаз в белковой кристаллографии. II**

**1.2. Уравнения Сэйра, их аналоги и следствия**

**1.3. Метод модификации функции распределения электронной : плотности.**

**1.4. Неотрицательность функции распределения электронной плотности. Принцип максимума определителя.**

**1.5. Использование геометрической информации**

**1.6. Использование моделей молекулы.**

**1.7. Комбинирование дополнительной информации различных типов**

**1.8. Сравнение методов улучшения наборов фаз структурных факторов для макромолекул.**

**ГЛАВА 2. УЛУЧШЕНИЕ НАБОРОВ ФАЗ СТРУКТУРНЫХ ФАКТОРОВ ПУТЕМ ПОСТРОЕНИЯ И МОДИФИКАЦИИ ГРУБОЙ ЛИБО СМЕШАННОЙ АТОМНОЙ МОДЕЛИ.**

**2.1. Общее описание метода.**

**2.2. Построение грубой модели**

**2.3. Модификация грубой модели.**

**2.4. Частичная реконструкция грубой модели.**

**2.5. Построение заключительного синтеза.**

**2.6. Анализ качества полученных данных.**

**2.7. Использование дополнительной информации**

**2.8. Использование смешанной атомной модели**

**2.9. Программное обеспечение**

**ГЛАВА 3. ПРОВЕРКА МЕТОДА НА МОДЕЛЬНЫХ ДАННЫХ.ИЗ**

**3.1. Общая организация численных экспериментов . ИЗ**

**3.2. Численный эксперимент по расширениго набора**

**3.3. Численный эксперимент по уточнению значений**

**ГЛАВА 4. УЛУЧШЕНИЕ НАБОРА ФАЗ ДЛЯ jf-КРИСТАЛЛИНА ШЬ**

**С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ГРУБОЙ АТОМНОЙ МОДЕЛИ.**

**4.1. Общая характеристика J-кристаллина ШЬ**

**4.2. Построение грубой модели**

**4.3. Модификация грубой модели.**

**4.4. Анализ качества наборов фаз.**

**4.5. Построение и анализ заключительного синтеза**

**ГЛАВА 5. УТОЧНЕНИЕ НАБОРА ФАЗ ДЛЯ $-КРИСТАЛЛИНА ШЬ**

**С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ СМЕШАННОЙ АТОМНОЙ МОДЕЛИ**

**5.1. Описание частичной модели.;**

**5.2. Уточнение частичной модели.**

**5.3. Использование смешанной атомной модели**

**5.4. Результат первого этапа улучшения набора фаз с помощью смешанной атомной модели**

**5.5. Использование смешанной атомной модели дам улучшения набора фаз (второй этап)**

**5.6. Эффективность методики для улучшения фаз структурных факторов jj-кристаллина ШЬ**

**ГЛАВА 6. УЛУЧШЕНИЕ НАБОРА ФАЗ СТРУКТУРНЫХ ФАКТОРОВ**

**ДЛЯ АСПАРТАТ-АМЙНОТРАНСФЕРАЗЫ**

**6.1. Общие сведения об аспартат-аминотрансферазе**

**6.2. Построение грубой модели**

**6.3. Модификация грубой модели.**

**6.4. Использование разностных синтезов**

**6.5. Построение и анализ заключительного синтеза**

**ВЫВОЛЦ.**