**Никонов, Станислав Владимирович.  
Оптимизация сьемки обратного пространства и оценки качества производных в белковой кристаллографии : диссертация ... кандидата физико-математических наук : 01.04.18. - Пущино, 1984. - 125 с. : ил.больше**

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

* **стр. 1**

**61: L^4//320-О /АКАдада[ НАУК ссср ИНСТИТУТ Б Е Ж А АН СССР На правах рукописи НЖОНОВ Станислав Владимирович: УДК 548.737 ОПТИШЗАЦИЯ СЪЕМКИ ОБРАТНОГО ПРОСТРАНСТВА И ОЦЕНКИ КАЧЕСТВА ПРОИЗВОДНЫХ В БЕЖОВОИ КРИСТАМОГРАФИИ (01.04.18 Кристаллография и кристаллофизика) Диссертация на соискание ученой степени**

* **стр. 3**

**1.6. Постановка задачи оптимизации ГЛАВА П. ОПТИМАЛЬНАЯ СТРАТЕГИЯ СЪЕМКИ ОБРАТНОГО ПРОСТРАНСТВА 2.1. Принципы и количественные критерии оптимальной съемки 2.2. Оптимизация съемки обратного пространства в методе экранной прецессии 2.3. Оптимизация съемки обратного пространства в методе вращения 2.4. Оценка эффективности оптимизации съемки обратного пространства 2.5. Планирование эксперимента и сбор...**

* **стр. 71**

**заданного количества частичных отражений в набо­ ре и угла мозаичности кристалла. 2,4. Оценка эффективности оптимизации съемки обратного пространства Эффективность оптимизации съемки обратного пространства была проверена нами для разных белков путем сравнения оптимизи­ рованных наборов структурных амплитуд**

**Оглавление диссертациикандидат физико-математических наук Никонов, Станислав Владимирович**

**В диссертации представлены результаты работ, выполненных автором в Институте белка АН СССР под руководством Ю.Н.Чиргад-зе. Автор приносит глубокую благодарность своему научному руководителю за постоянный интерес к работе, оказание всесторонней помощи и участие в обсуждении результатов. Автор благодарит сотрудников лаборатории структурного анализа Института белка АН СССР Сергеева Ю.В., Бражникова Е.В., Фоменкову Н.П. и Невскую H.A., с которыми он выполнял совместные работы по сбору и обработке дифракционных данных, и сотрудника лаборатории структурного анализа Института молекулярной биологии АН СССР Васильева Д.Г. за предоставление адаптированной к ЭВМ ЕС 1040 версии программ обработки данных, полученных методом вращения-качания, и обработку оптимизированного набора структурных амплитуд лейцинаминопептидазы. Автор выражает свою глубокую признательность Гороховой Т.Л. за большую помощь в оформлении данной работы.**

**ВВВДЕНИЕ.**

**ГЛАВА I. ОСОБЕННОСТИ ПОЛУЧЕНИЯ НАБОРОВ ДИФРАКЦИОННЫХ ДАННЫХ В БЕЛКОВОЙ КРИСТАЛЛОГРАФИИ (ЛИТЕРАТУРНЫЙ ОБЗОР)**

**1.1. Характерные особенности белковых кристаллов.**

**1.2. Объем и характер экспериментальных данных в белковой кристаллографии**

**1.3. Современные методы съемки обратного пространства**

**1.4. Формирование таблицы структурных амплитуд. Проблемы шкалирования**

**1.5. Характеристики качества наборов экспериментальных данных.**

**1.6. Постановка задачи оптимизации**

**ГЛАВА П. ОПТИМАЛЬНАЯ СТРАТЕГИЯ СЪЕМКИ ОБРАТНОГО**

**ПРОСТРАНСТВА**

**2.1. Принципы и количественные критерии оптимальной съемки.**

**2.2. Оптимизация съемки обратного пространства в методе экранной прецессии**

**2.3. Оптимизация съемки обратного пространства в методе вращения.**

**2.4. Оценка эффективности оптимизации съемки обратного пространства**

**2.5. Планирование эксперимента и сбор оптимизированных наборов данных от кристаллов ^-кристаллинов фракций П и Ш £ и лейцинаминопептидазы.**

**ГЛАВА Ш. ВЫЧИСЛЕНИЕ КОЭФФИЦИЕНТА ПРИВВДЕНШ СТРУКТУРНЫХ АМПЛИТУД ПРОИЗВОДНЫХ К ЖАЛЕ НАТИВНОГО БЕЖА НА БАЗЕ СТАТИСТИЧЕСКИХ КРИТЕРИЕВ. УЛУЧШЕНИЕ ОЦЕНОК КАЧЕСТВА ПРОИЗВОДНЫХ 3.1. Корректное определение коэффициента приведения данных от производных к шкале нативного белка. Критерии изоморфизма**

**3.2. Формула для вычисления коэффициента приведения.**

**3.3. Статистический критерий отбора шкалируемых отражений**

**3.4. Оценка точности вычислений. Формирование набора экспериментальных данных ^ р у-кристаллина Шьпри разрешении 3,0 А**