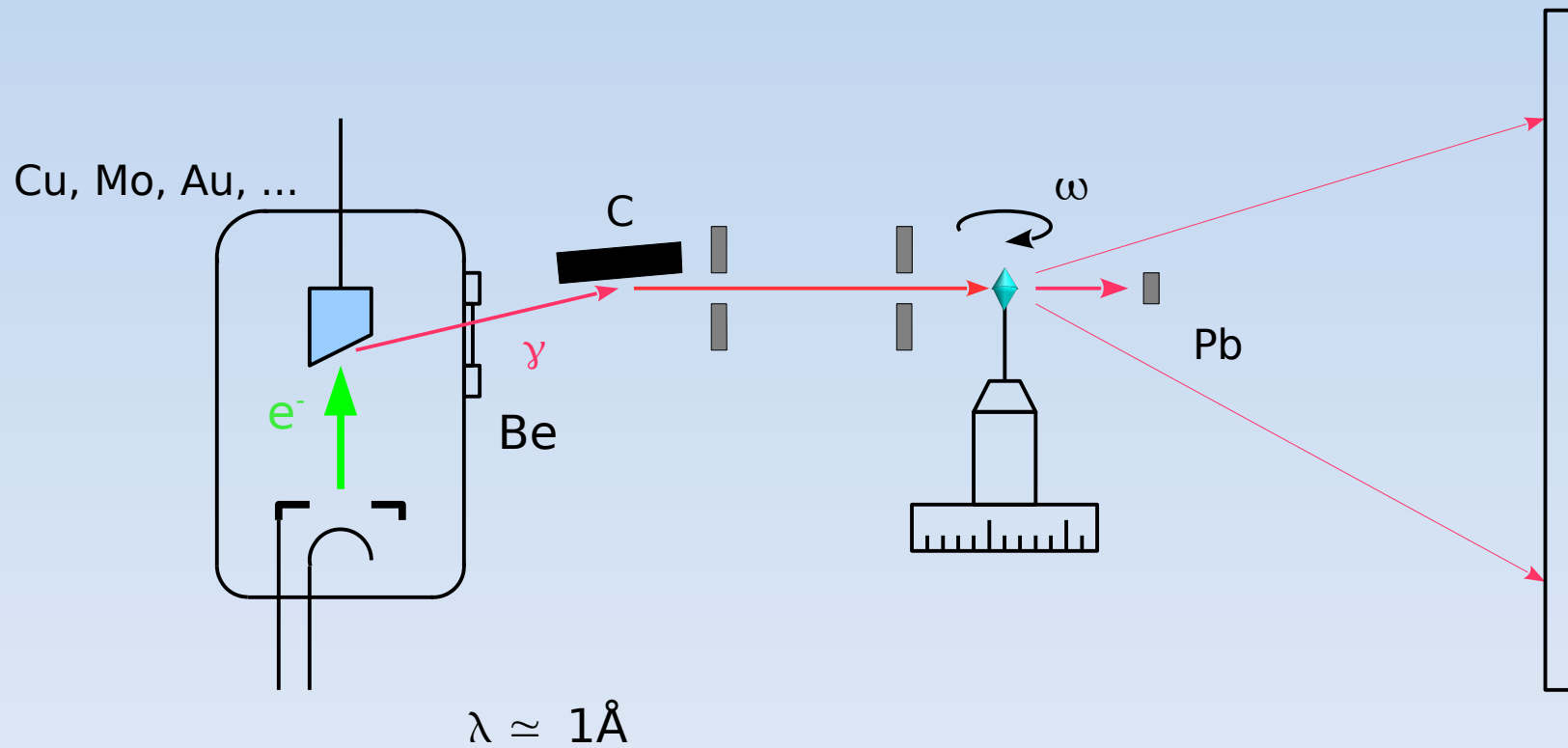


- Rentgenostruktūrinē analizē

Rengenostruktūrinė analizė (RA)

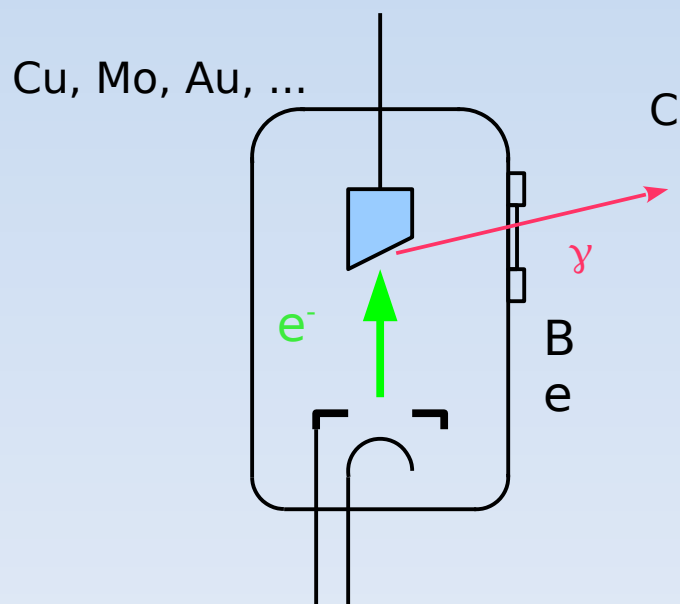
- RA teikiama informacija
- Pavyzdžio paruošimas
- RA fizikiniai principai
- RA duomenys ir jų surinkimas
- RA kaip mokslo metodo taikymo pavyzdys

Duomenų surinkimas

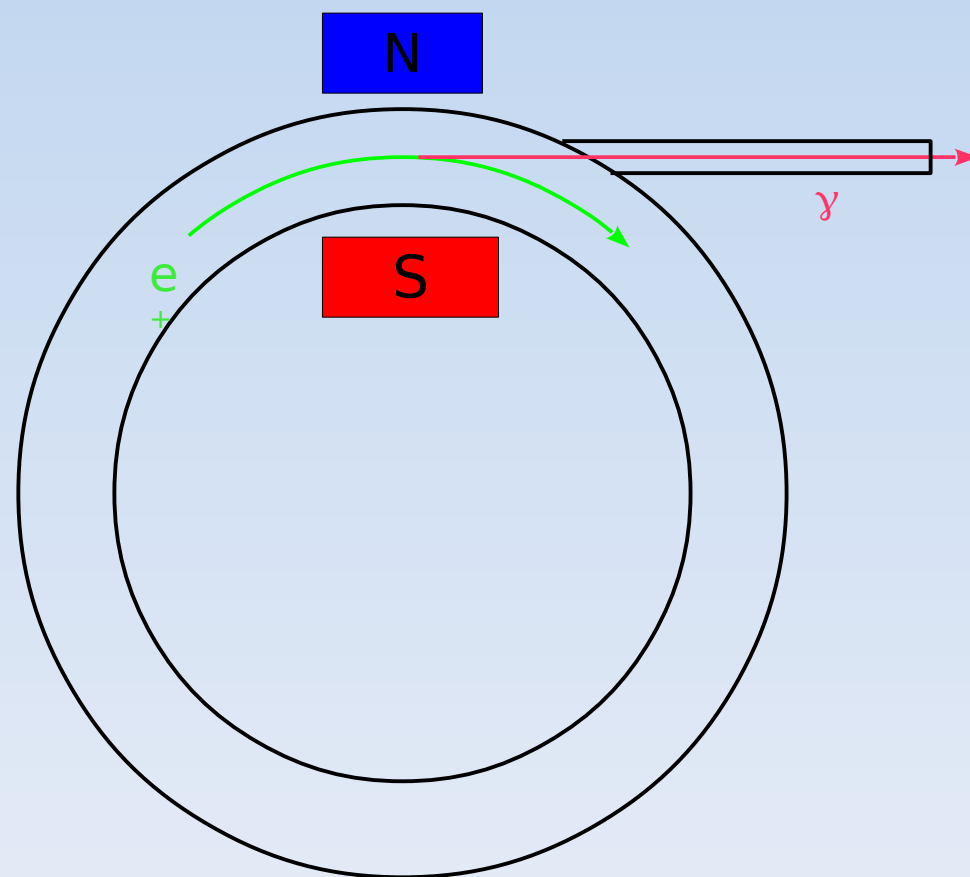


Spindulių šaltiniai

Rentgeno vamzdeliai

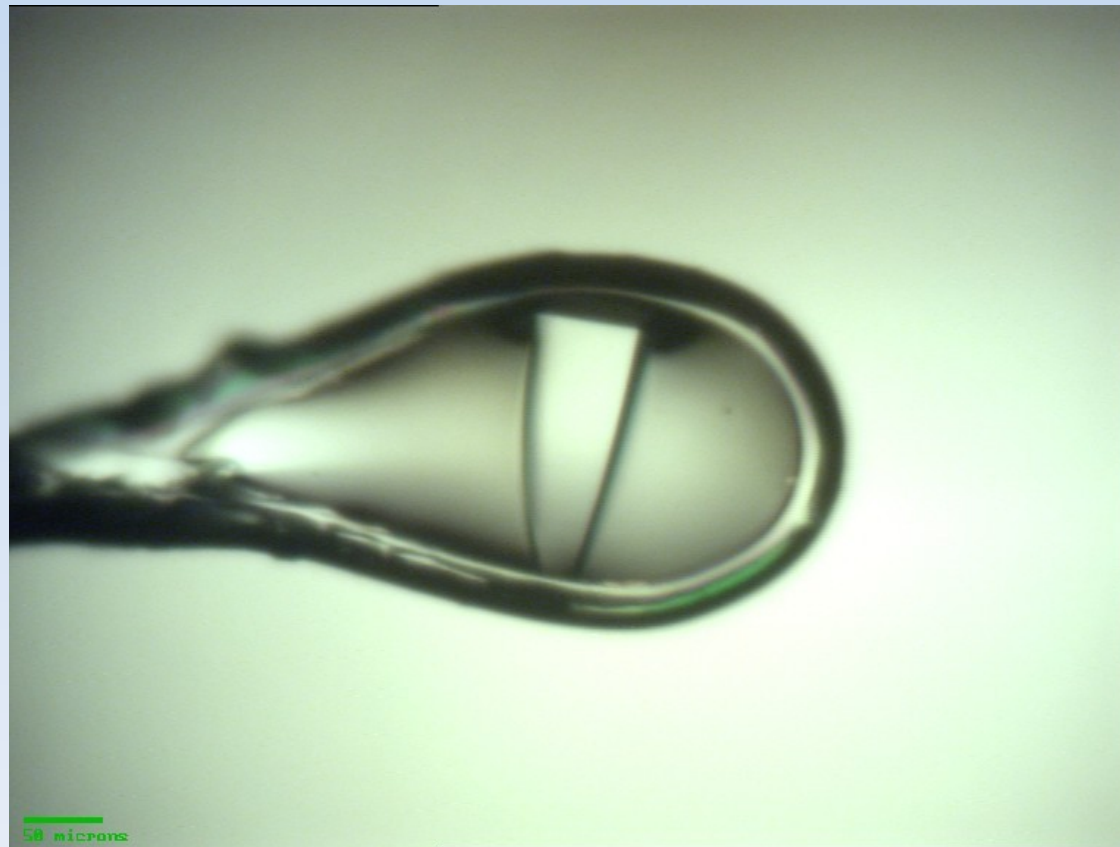


Sinchrononai

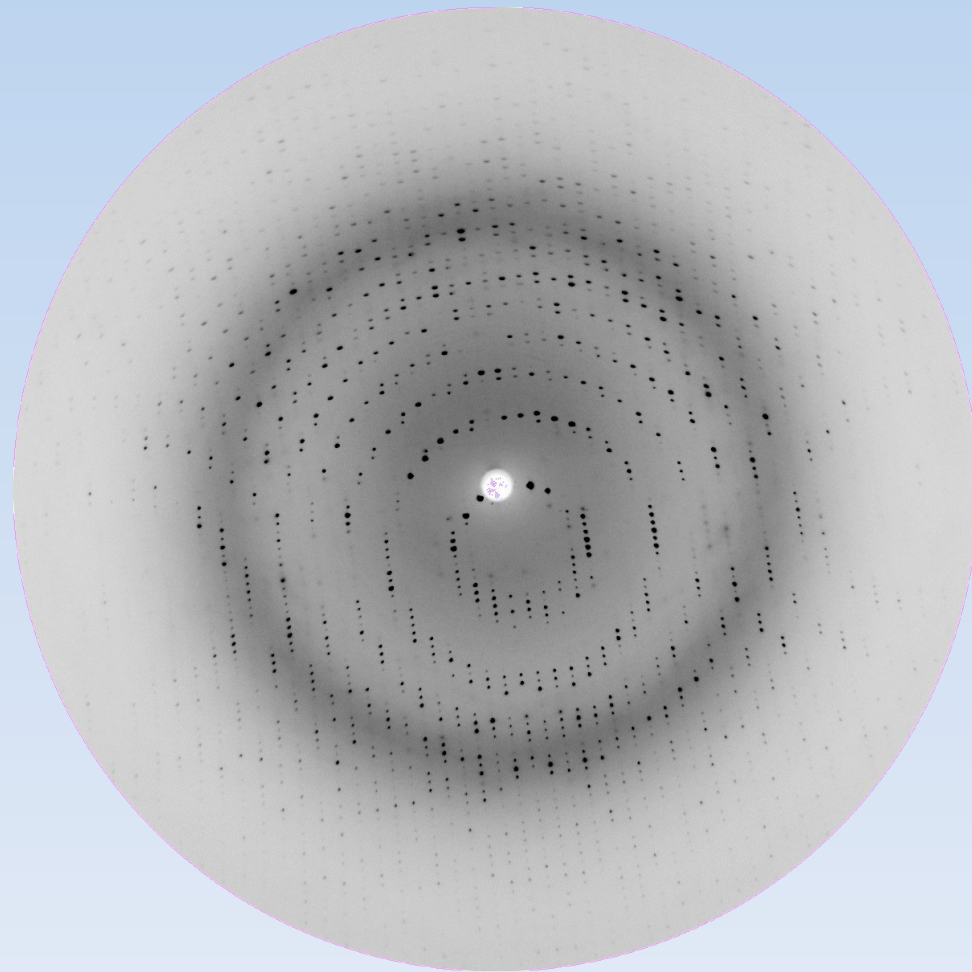
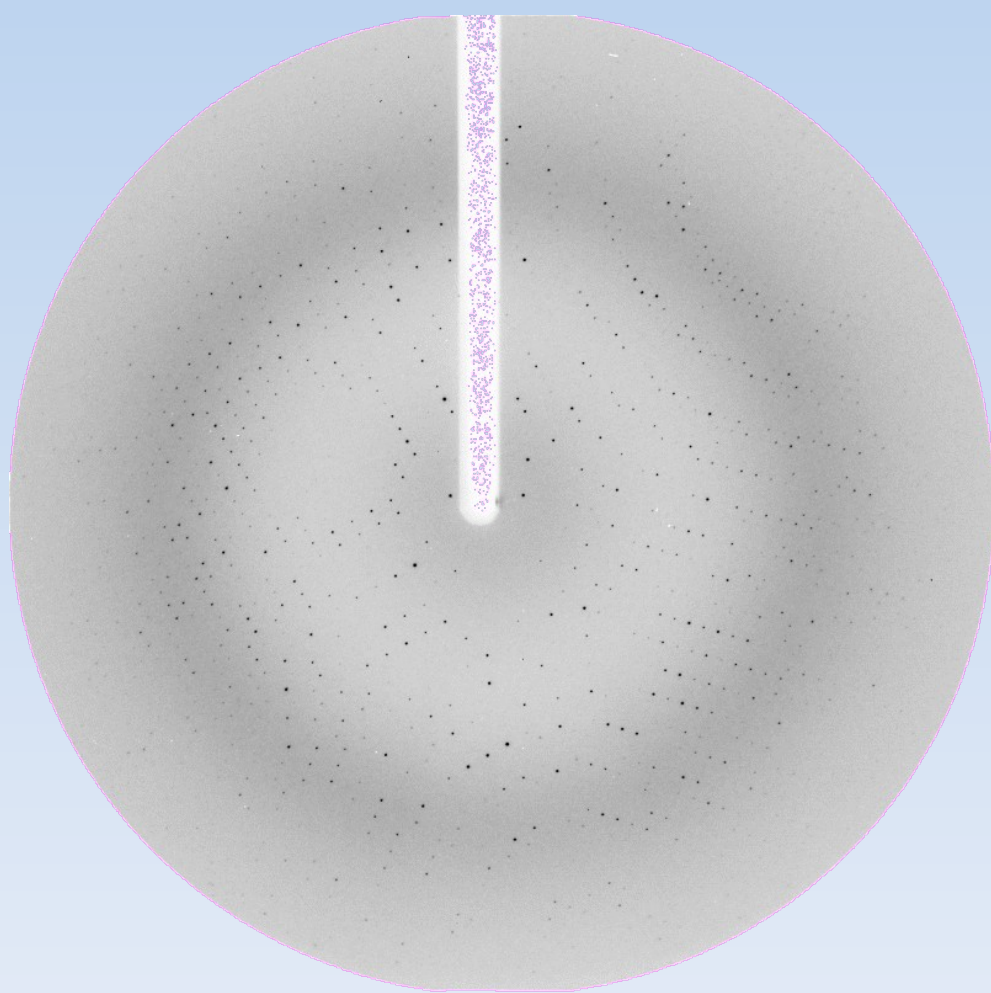


Kristalų montavimas ir šaldymas

- Kristalų montavimas.



Difrakcijos vaizdo pavyzdys



Duomenų interpretavimas

The image shows a screenshot of a molecular visualization software interface, likely CCP4, running on a Linux system. The main window displays a 3D model of a protein structure, rendered as a blue wireframe with green sticks representing atoms. The interface includes several menus and a command-line interface.

Top Menu Bar: Controls, Display, Graph, Rebuild, Bones, Density, Menus

Object_menu (Left Panel):

- BUILD on
- MYS1 off
- MYS2 off
- MINI off
- REFMAC off
- WAT on
- NEG on
- HG on
- NA off
- NB off
- AONB off
- BONA off
- UNREF off
- OLD off
- GLYC on
- TRIS on
- MES on
- SRT on
- SST on
- RRT on
- DELFWT on
- FWT on

User Menu (Right Panel):

- Centre_ID
- Clear_ID
- Clear_flags
- @remap
- @delpos
- @delneg
-
- @mir
- @mod
- @aomit
- @omit
- @make
- @remake
- @regenerate
- @next-ca
- @prev-ca
- @next-O
- @prev-O
- Move_zone
- Move_atom
- Dial_next
- Dial_previous
- Yes
- Refi_zone
- Lego_Side_Ch
- RSR_rigid
- RSR_rotamer
- @store
- @ci
- @rcsdiff
- Dist_define
-
- @on_startup
- @ldmask
- @ldomac
- @reload
- @ldbuild
- @ldmaps

Command-Line Interface (Bottom Left):

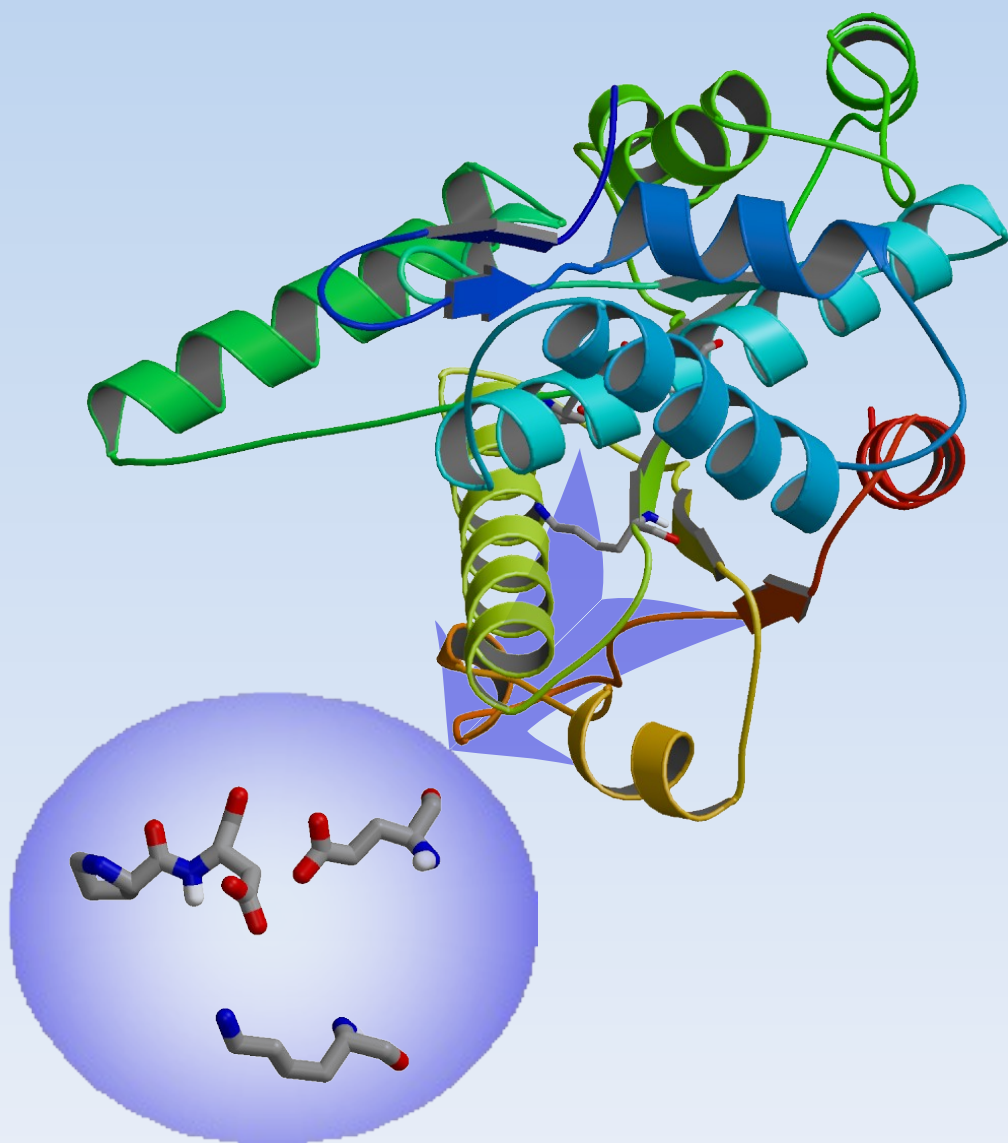
```
Mol> Created
Sam> File ty
Sam> Databa
Sam> Space f
Sam> Space f
Sam> Molecul
Sam>
Mol> Nothin
Mol> Created
Sam> File ty
Sam> Databa
Sam> Space f
Sam> Space f
Sam> Molecul
Sam>
Mol> Nothin
Mol> Created
Sam> File ty
Sam> Databa
Sam> Space f
Sam> Space f
Sam> Molecul
Sam>
Mol> Nothin
Mol> Created
Sam> File ty
Sam> Databa
Sam> Space f
Sam> Space f
Sam> Molecul
Sam>
Mol> Nothin
Mol> Created
Mol> Macro i
As2> Macro i
As2> Macro i
Map> New map
Map>
Map> New map
Map>
Map> centre-atom
As3> Macro in database.
Map> New map format :- )
Map> red
Map> New map format :- )
Map> blue
```

Bottom Right Controls:

Zoom	Slab
Rot Z	Trans Z
Rot Y	Trans Y
Rot X	Trans X

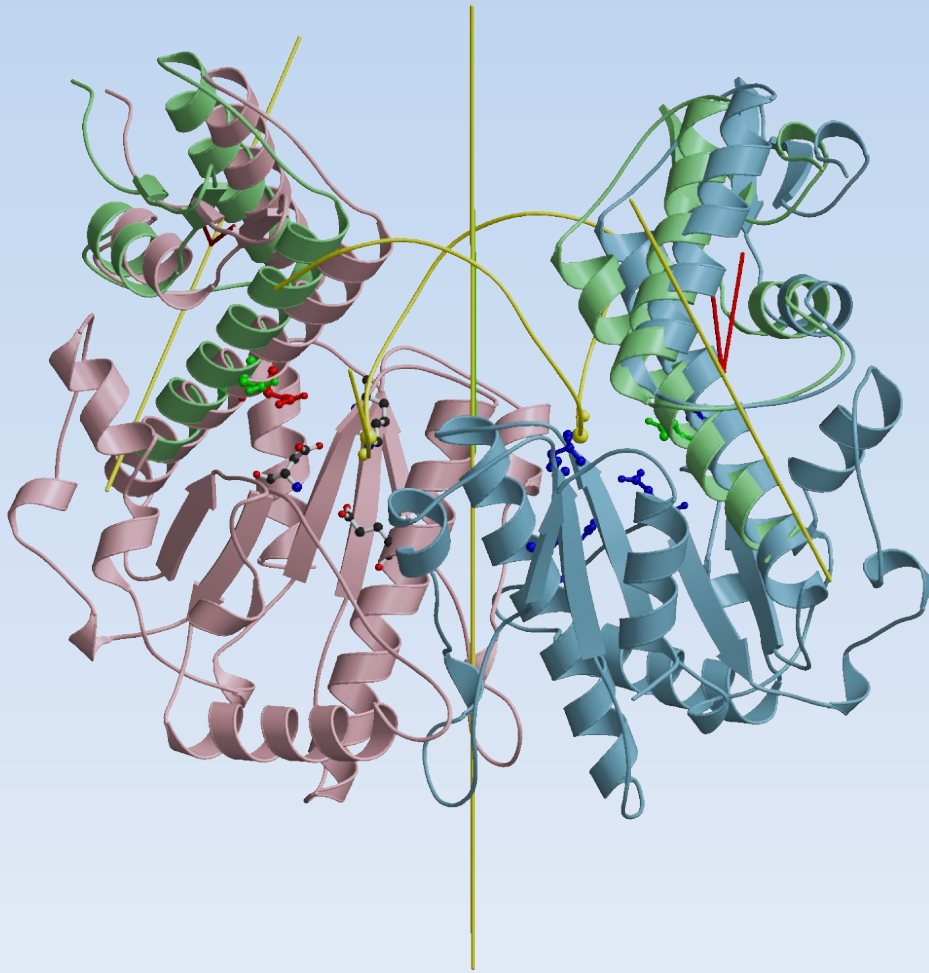
Status Bar (Bottom): 11 1580

Rentgenostruktūrinės analizės galimybės



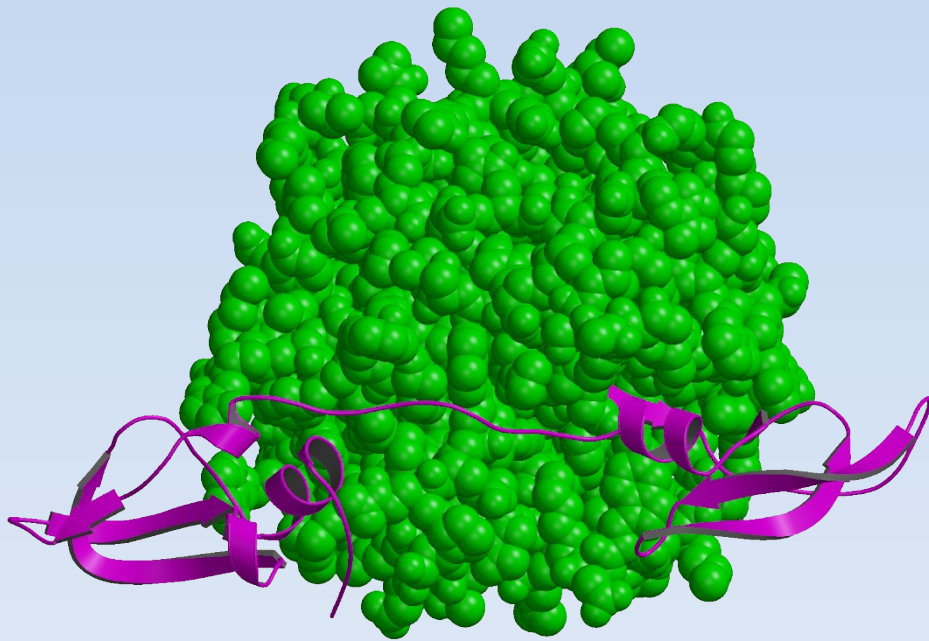
- Individualių atomų koordinatės
- Atomų šiluminiai virpesiai ir kristalo defektai (B-faktoriai)
- Kristalo simetrija, molekulių išsidėstymas kristale

RA galimybės (2)



- Bendra baltymo struktūra
- Oligomerinė būseną
- Domenu ir subdomenu judesiai

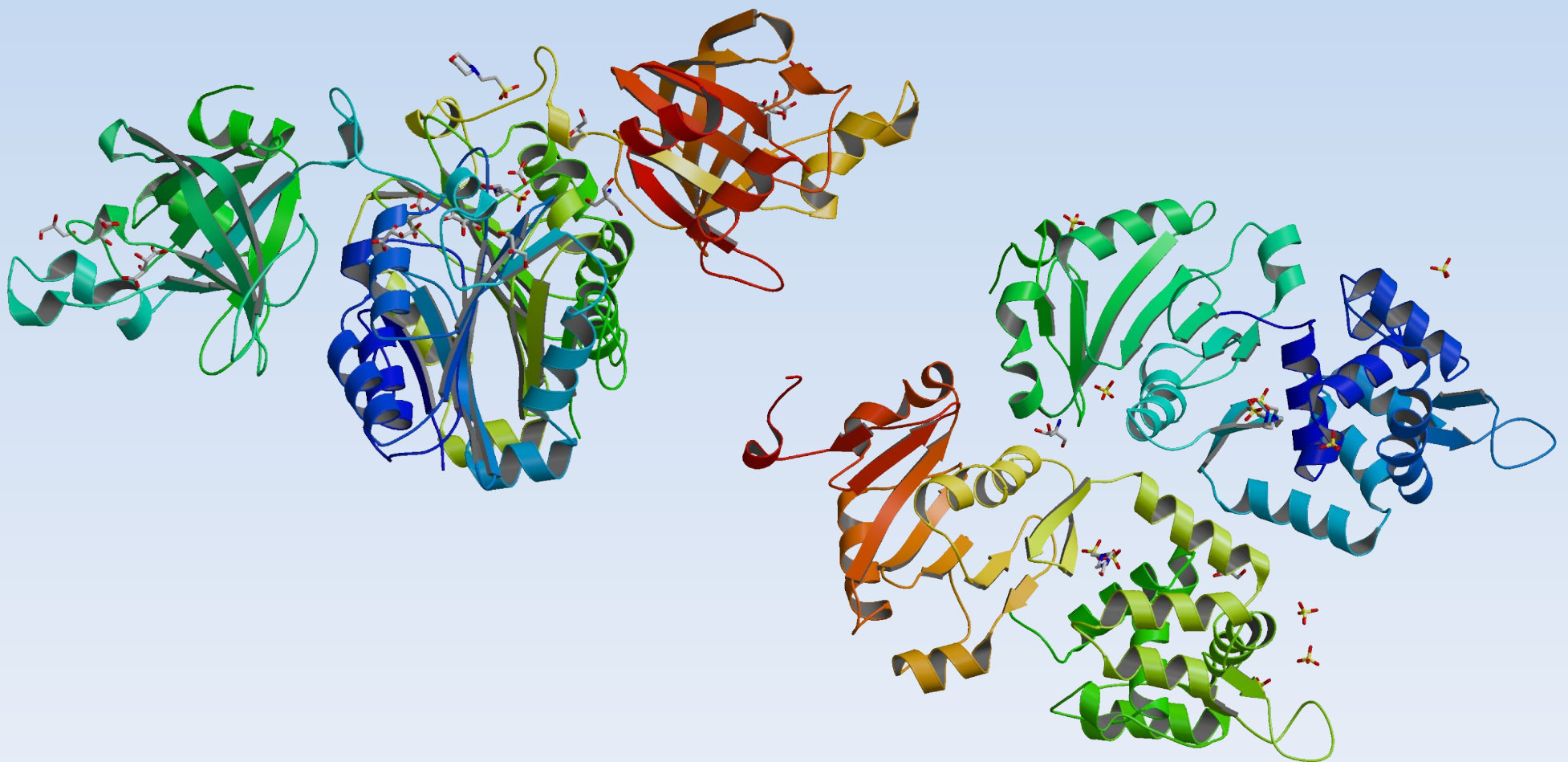
RA galimybės (3)



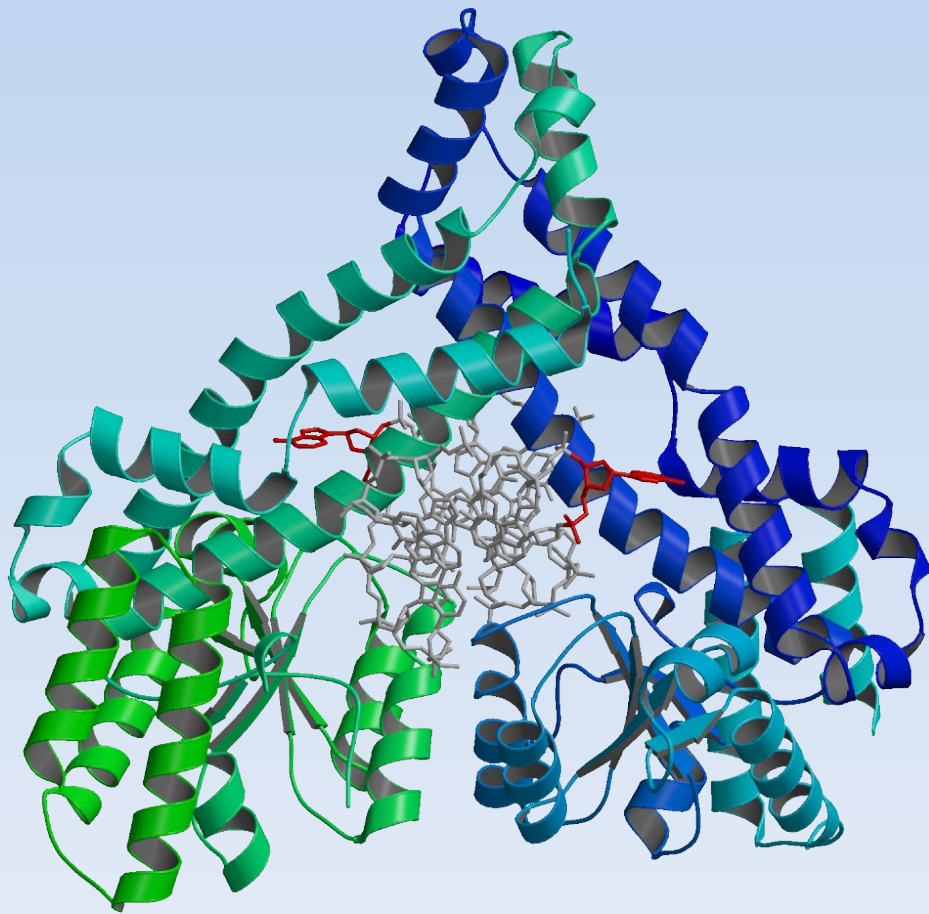
- Kompleksai su ligandais, substratais, produktais, inhibitoriais...

RA galimybės (4)

- Baltymo domeninė struktūra



RA galimybės (5)



- Neláuktos sąveikos su substratu ypatybės