
Tereza Hladíková, Emma Bielokostolská

SYNCHROTRONEM K LÉČIVŮM: MODELUJ SI SÁM

Obsah



- Synchrotron



- Zpracování difrakčních dat

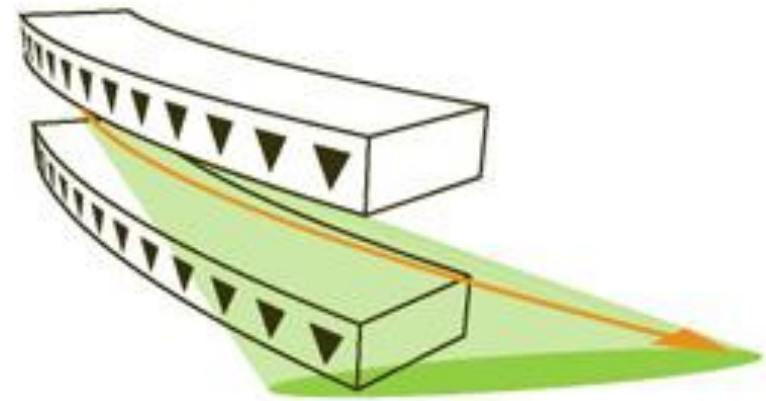
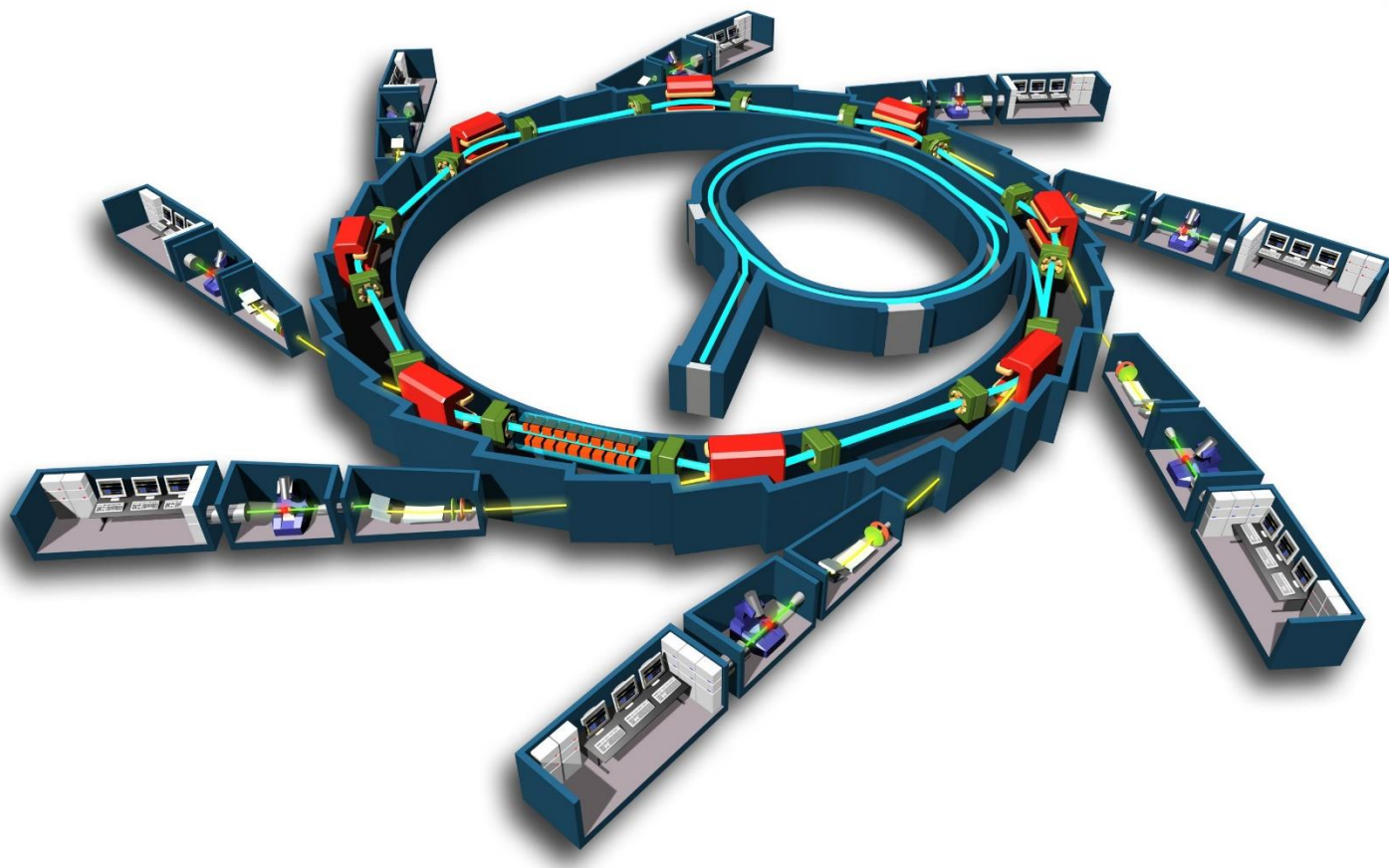


- Řešení struktury

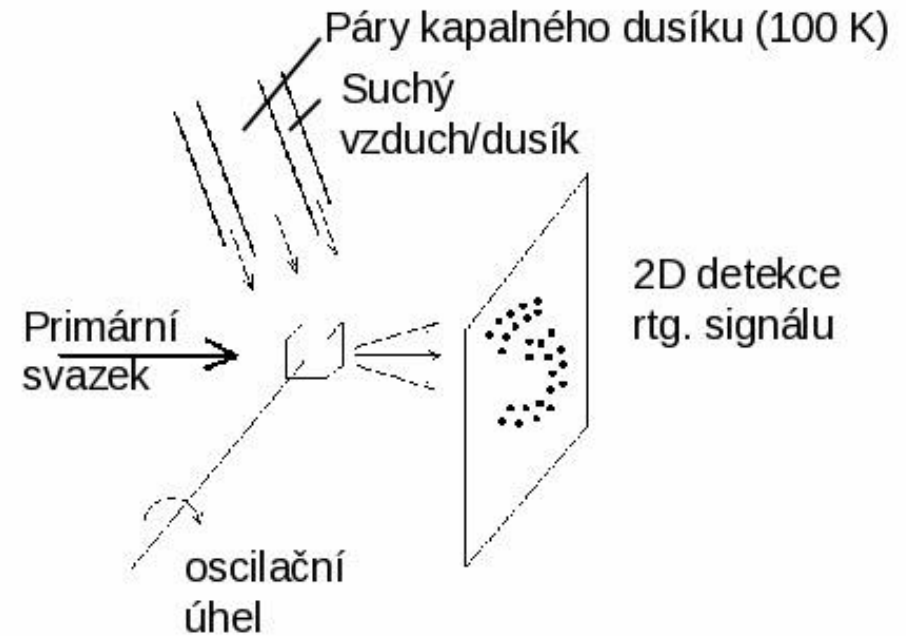
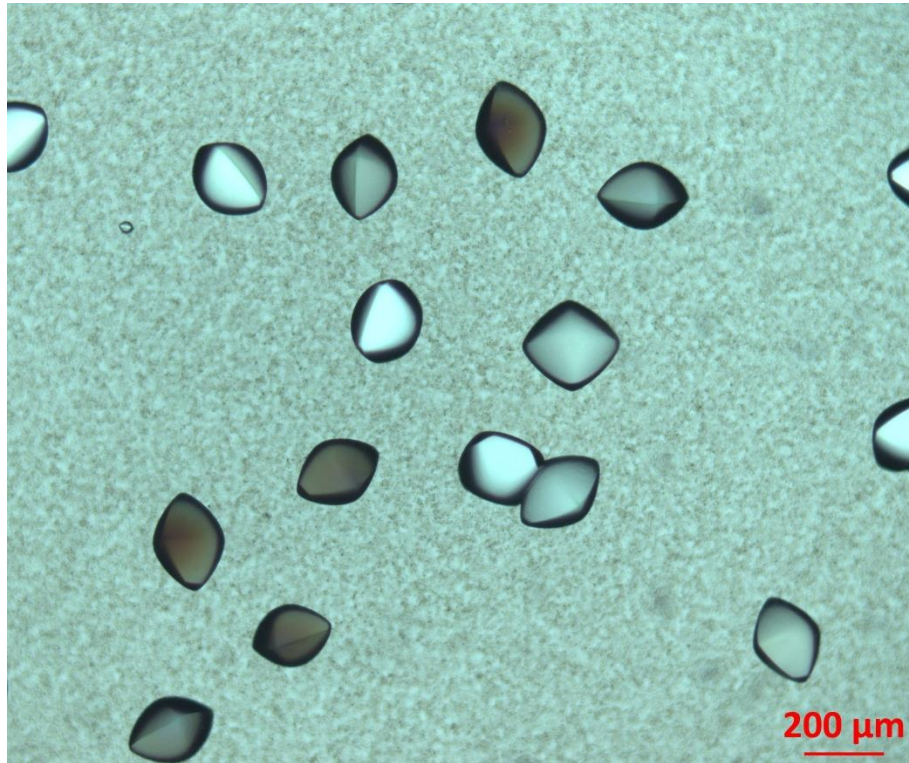


- Vazba ligandu

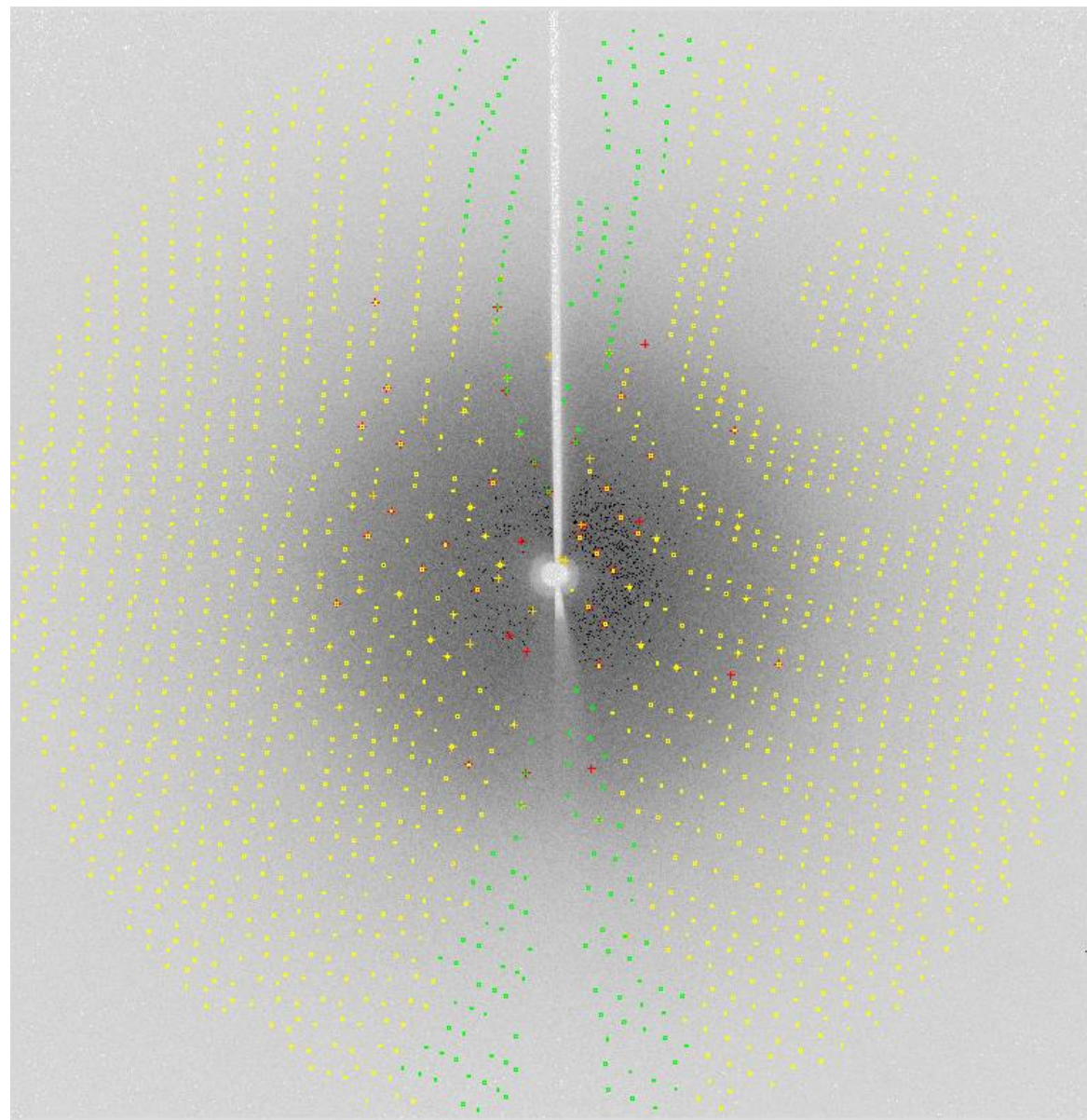
Synchrotron SOLEIL



Krystaly makromolekul, experiment



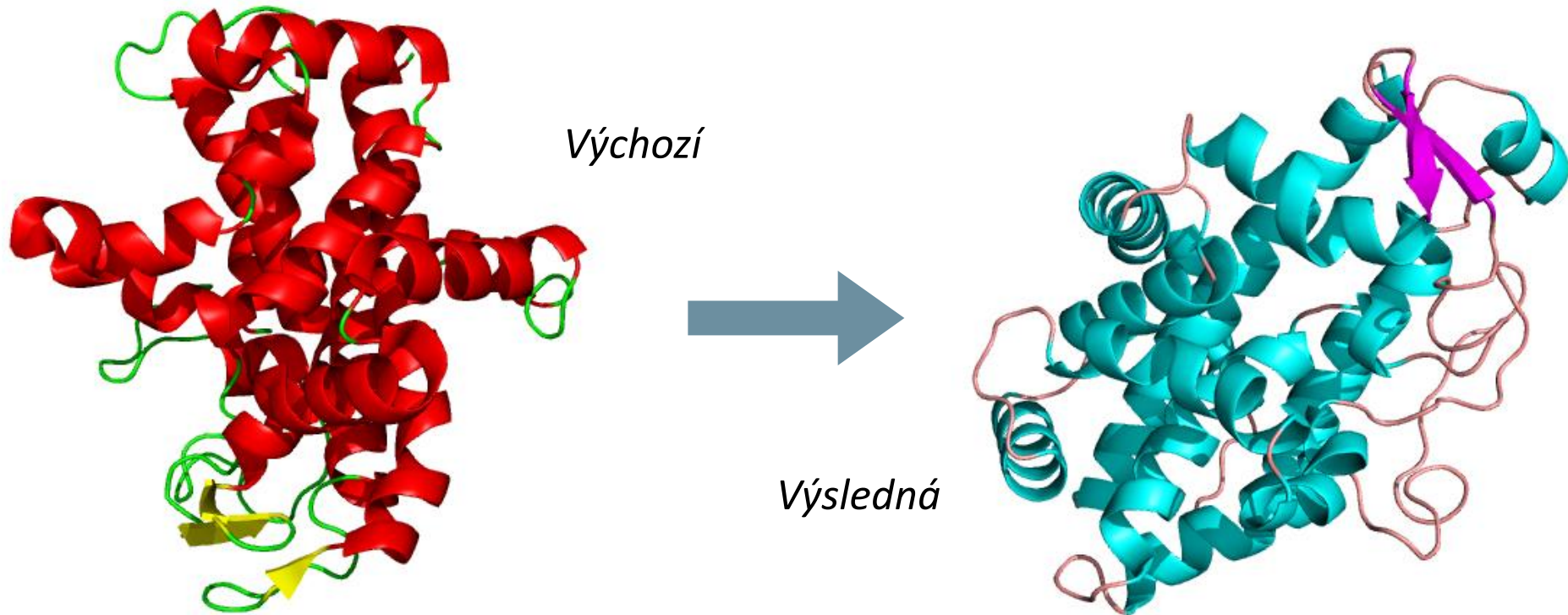
Zpracování difrakčních dat

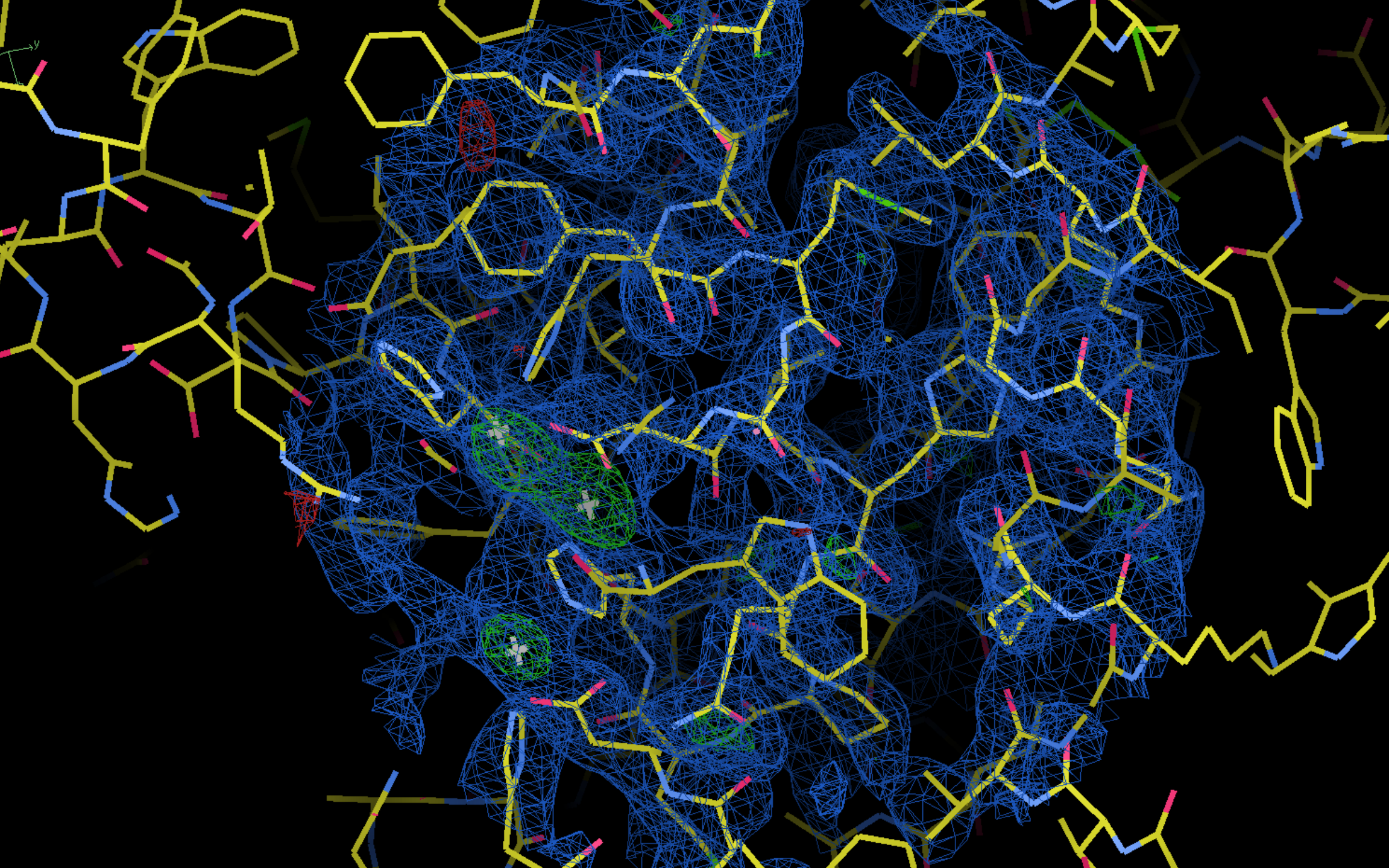


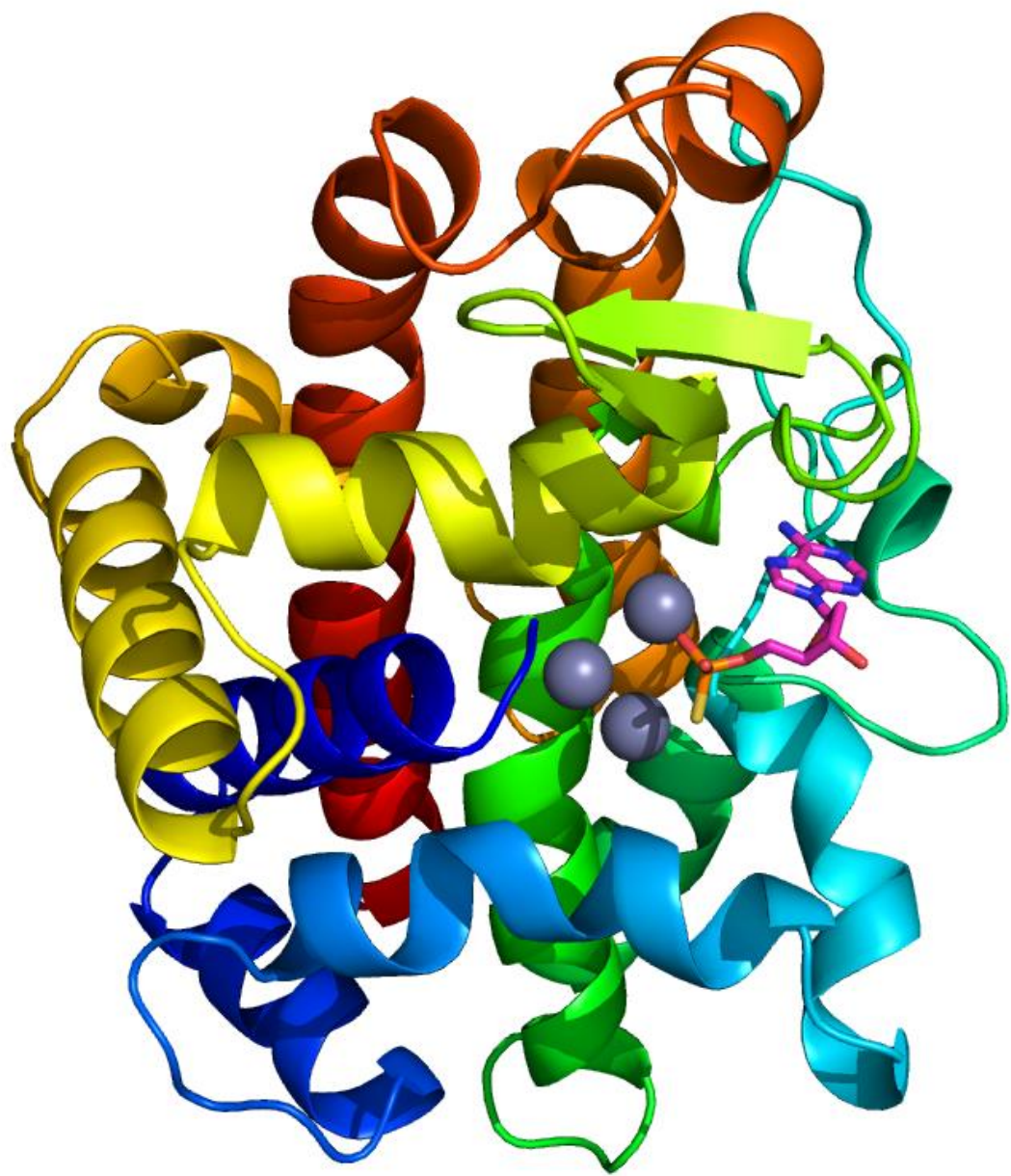
Prostorová grupa	$P2_1$
a, b, c [Å]	41,65; 62,31; 47,98
α, β, γ	90°, 106,79°, 90°
Signál(I)/šum(σ)	9,0
Korelační koeficient	0,994

Řešení fázového problému

- Nelze přímo spočítat elektronová hustota
- Metoda molekulárního nahrazení
- Vzor – 3SNG (z PDB databáze)







Použité programy

- **iMOSFLM** – zpracování difrakčních dat
- **AIMLESS** – stanovení symetrie krystalu, redukce dat
- **Phaser** – řešení fázového problému
- **ARP/wARP** – automatické přebudování modelu
- **Refmac5** – upřesňování struktury, výpočet el. hustoty
- **COOT** – manuální úpravy modelu

Shrnutí

- Difrakční data naměřena na synchrotronu Bessy II
- Data zpracována s rozlišením 1,8 Å
- Fázový problém – molekulární nahrazení
- Pozorování vazby ligandu do aktivního místa enzymu

Děkujeme za pozornost

Týden vědy na FJFI, 19. – 24. 6. 2016