

# Výpočetní metody v makromolekulární krystalografii

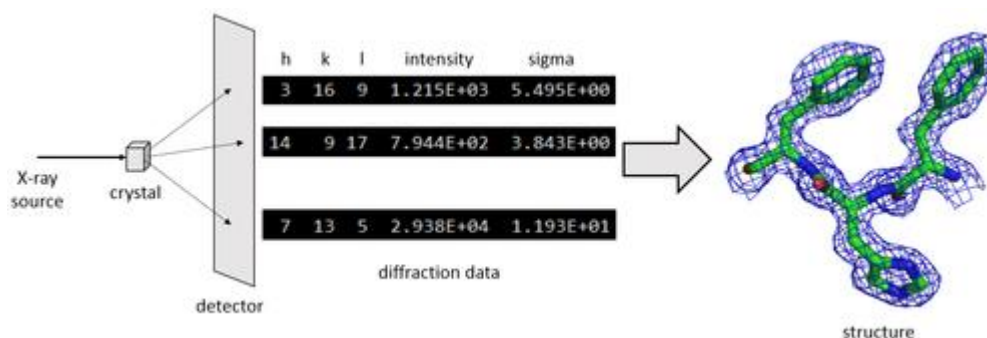
Monokrystalová difrakce je stále nejpoužívanější metodou pro získávání strukturních informací o biologicky aktivních molekulách. Pomocí této metody se můžeme dozvědět mnoho cenných informací o buněčných procesech, imunitním systému, evoluci, ale také o možných aplikacích pro biotechnologický průmysl.

Jako mnoho dalších fyzikálních oborů, makromolekulární krystalografie prochází neustálým vývojem a to jednak v oblasti vylepšování experimentálního zařízení (konvenční zdroje, synchrotrony, lasery s volnými elektrony, detektory záření), ale také v oblasti zpracování naměřených dat.

V současné době nabízíme tato dvě témata:

- **Identifikace slabě vázaných ligandů makromolekul.**
- **Analýza a škálování dat anisotropně difraktujících krystalů.**

Nadále chceme rozvíjet program, který pomáhá jiným uživatelům správně rozpoznávat signál difrakčních dat - [PAIREF](#).



Kontakt:

doc. Ing. Petr Kolenko, Ph.D.

Katedra inženýrství pevných látek FJFI ČVUT

petr.kolenko#fjfi.cvut.cz

00420 224 358 606

[kmlinux.fjfi.cvut.cz/~kolenpe1](mailto:kmlinux.fjfi.cvut.cz/~kolenpe1)

Tento projekt je řešený spolu s [Biotechnologickým ústavem AV ČR, v.v.i.](#), který sídlí v centru [BIOCEV](#) ve Vestci u Prahy. Spolupracujeme především s [Laboratoří struktury a funkce biomolekul](#) pod vedením Ing. Jana Dohnálka, Ph.D.