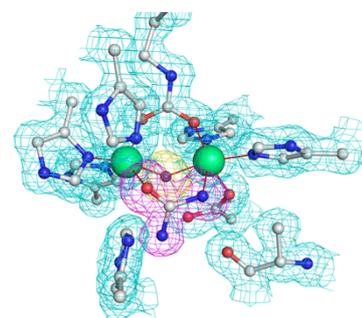
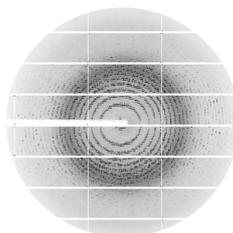
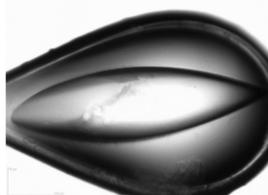


## Biocristallografia

Teoria e applicazioni per la determinazione strutturale di macromolecole biologiche mediante esperimenti di diffrazione a raggi X

### Finalità del corso

Il corso, della durata di 18 ore, sarà strutturato in due parti: una prima parte teorica e una seconda parte pratica svolta al computer. Nella prima parte il dottorando apprenderà le basi della cristallografia a raggi X applicata a macromolecole biologiche, incluse le modalità di cristallizzazione di proteine, le caratteristiche della luce a raggi X e i principi dell'interazione tra i raggi X e cristallo. In questa fase il dottorando acquisirà anche conoscenza sui metodi per la determinazione strutturale di macromolecole biologiche in cristallografia. Nella seconda parte del corso il dottorando lavorerà con set di dati sperimentali ottenuti da esperimenti di diffrazione su cristalli proteici e, attraverso l'utilizzo di specifici programmi, apprenderà le nozioni base per l'ottenimento e l'utilizzo delle mappe di densità elettronica necessarie per la successiva procedura di affinamento del modello proteico fino alla determinazione della struttura a raggi X finale.



### Programma:

- Principi della cristallizzazione di macromolecole biologiche e introduzione alle principali tecniche di cristallizzazione
- Proprietà dei cristalli, operazioni di simmetria e definizione di gruppo spaziale
- Teoria della diffrazione di raggi X, interazione luce - materia e metodi per raccolta dati
- Metodi per la determinazione della fase in biocristallografia
- Raffinamento della struttura cristallografica, validazione e deposizione nel PDB

Durante l'esercitazione di laboratorio, lo studente effettuerà il processamento di dati di diffrazione, la determinazione della fase utilizzando il software PHASER, l'affinamento del modello proteico mediante l'utilizzo del software REFMAC e la validazione della struttura a raggi X finale mediante l'utilizzo di COOT e di web server.

### Luogo, data e ora delle lezioni

Le lezioni teoriche si svolgeranno in aula T, via Selmi 3, dalle 14 alle 17 nelle seguenti giornate:

26/09/2022

27/09/2022

28/09/2022

29/09/2022

Gli studenti che, in quel periodo, staranno svolgendo la propria attività di ricerca fuori sede potranno seguire le lezioni teoriche on-line su piattaforma MICROSOFT TEAMS.

L'esercitazione di laboratorio si svolgerà solo in presenza nel laboratorio geno-informatico di Via della Beverara 123 nei giorni 5/10 e 6/10/2022 dalle 14 alle 17.

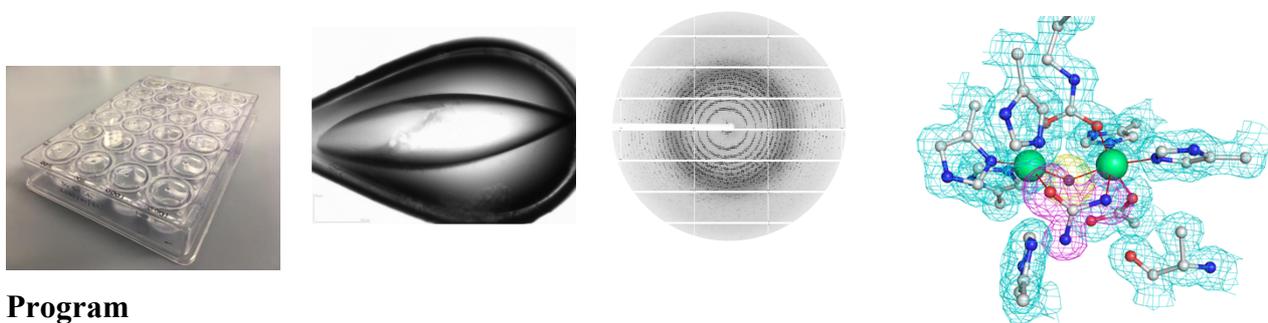
Gli studenti interessati a seguire il corso sono pregati di iscriversi inviando una e-mail con oggetto "Biocristallography\_PhD" all'indirizzo mail [luca.mazzei2@unibo.it](mailto:luca.mazzei2@unibo.it).

## **Biocrystallography**

Theory and applications for the structural determination of biological macromolecules by using X-ray diffraction experiments

### **Goal of the course**

The 18-hour course will consist of a first theoretical part, followed by a practical computational session. In the first part, students will learn the basis of macromolecular crystallography, including principles of protein crystallization, properties of the X-ray radiation and its interaction with crystalline matter. Students will also acquire knowledge on the methods for the structural determination of biological macromolecules by X-ray diffraction. In the second part of the course, students will process experimental X-ray diffraction datasets collected on protein crystals. The resulting electron density maps will be used for the refinement of the protein model with the aim of determining the final X-ray structure.



### **Program**

- Principles of macromolecular crystallization and main crystallization techniques
- Properties of macromolecular crystals, symmetry operations and definition of space group
- Principles of X-ray diffraction, X-rays interaction with crystalline matter and data collection strategies
- Methods for the phase determination in macromolecular crystallography
- Structural refinement, structure validation and deposition in the PDB

In the laboratory experience students will carry out the processing of experimental diffraction data, the determination of the initial phases using PHASER, the structural refinement of the protein model by using REFMAC and the validation of the final X-ray structure using COOT software and other available web servers.

### **Place, date, and time**

Lessons - aula T, via Selmi 3, from 2 PM to 5 PM on:

26/09/2022

27/09/2022

28/09/2022

29/09/2022

Those students who will do their research activity abroad within the lesson week will be able to follow the lessons online by using MICROSOFT TEAMS.

Laboratory experience - Laboratorio geno-informatico, Via della Beverara 123, next 5/10 and 6/10/2022 from 2 PM to 5 PM. The experience will be held only in person.

Students who are interested in attending the course are kindly asked to register by sending an email to: [luca.mazzei2@unibo.it](mailto:luca.mazzei2@unibo.it) with subject line "Biocrystallography\_PhD".