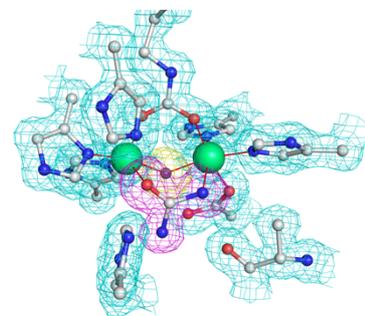
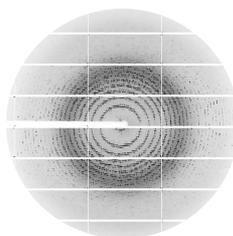
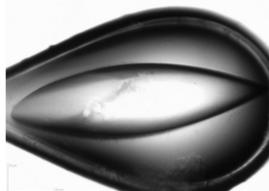


## **Biocristallografia**

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 16 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**

- L.1 (2h - teorica): Basi teoriche e aspetti sperimentali della cristallizzazione di macromolecole biologiche
- L.2 (2h - teorica): Teoria della diffrazione di raggi X, interazione luce - materia e raccolta dati
- L.3 (2h - teorica): Metodi per la risoluzione della struttura di proteine (Sostituzione Molecolare e determinazione sperimentale della fase)
- L.4 (2h - teorica): Cenni sulla struttura delle proteine, sul Protein Data Bank e basi dell'affinamento computazionale
- L.5 (4h - bioinf.): Processamento di dati di diffrazione, determinazione della fase utilizzando il software PHASER e visualizzazione delle mappe di densità elettroniche ottenute mediante il software COOT
- L.6 (4h - bioinf.): Affinamento del modello proteico mediante l'utilizzo del software REFMAC e validazione della struttura a raggi X finale mediante l'utilizzo di COOT e di web server.

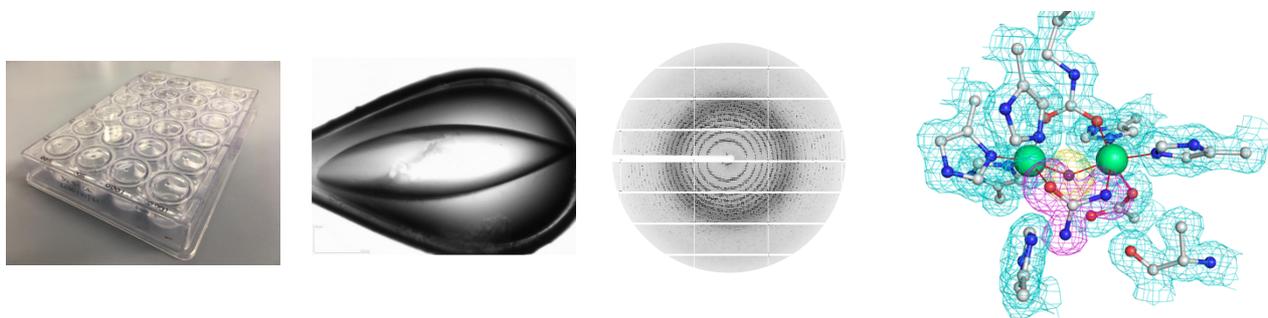
Gli studenti interessati a seguire il corso sono pregati di iscriversi inviando una email con oggetto "Biocristallography\_PhD" all'indirizzo mail [luca.mazzei2@unibo.it](mailto:luca.mazzei2@unibo.it).

## **Biocrystallography**

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

### **Goal of the course**

The 16-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**

- L.1 (2h - theory): Principles and experimental aspects of macromolecular crystallization
- L.2 (2h - theory): Basis of X-ray diffraction, X-rays interactions with crystalline matter and data collection strategies
- L.3 (2h - theory): Methods for the structural determination of biological macromolecules (Molecular Replacement and experimental phasing)
- L.4 (2h - theory): Notes on the structure of proteins and the Protein Data Bank, theory of crystallographic refinement
- L.5 (4h - bioinf.): Data processing, determination of the initial phases by the use of PHASER software and visualization of the resulting electron density maps by the use of COOT software
- L.6 (4h - bioinf.): Molecular refinement of the protein model by using REFMAC software and validation of the final X-ray structure by the use of COOT software and available web servers.

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”.