

## **Preparazione per le esercitazioni del Corso di Biocristallografia e Microscopia Elettronica**

**Anno accademico 2022/2023**

Le esercitazioni prevederanno l'analisi dei dati cristallografici raccolti sulla linea di luce di sincrotrone XRD2 di Elettra, dall'indicizzazione all'affinamento della struttura e alla sua validazione.

- (1) Scaricare i dati di diffrazione raccolti su un cristallo di lisozima.
- (2) Installare i software necessari per l'analisi. Per l'analisi dei dati cristallografici verranno utilizzati diversi programmi dalla suite di software CCP4 (Mosflm, MolRep o analogo software per il Molecular Replacement, Refmac, Coot ed eventualmente qualche strumento per la validazione). CCP4 e i suoi software sono gratuiti.

### **Dati di diffrazione raccolti presso la beamline XRD2 di Elettra**

Le immagini di diffrazione possono essere scaricate in formato compresso dalla mia cartella di Google Drive, al seguente link:

[https://drive.google.com/drive/folders/1i89qSxybx339XIDVGUYTqHJHAEWh\\_P6p?usp=drive\\_link](https://drive.google.com/drive/folders/1i89qSxybx339XIDVGUYTqHJHAEWh_P6p?usp=drive_link)

Per comodità il link sarà disponibile anche su Moodle in forma "clickabile".

Ci sono due raccolte di dati, ciascuna composta da 720 immagini di diffrazione. Ciascun file ha una dimensione di circa 6 MB.

### **Installazione di CCP4**

Per scaricare il software, andate sul sito <http://www.ccp4.ac.uk/> (il link è anche presente in versione "clickabile" su Moodle). Gli sviluppatori hanno appena rilasciato una nuova versione (8.0). Suggesto di scaricare quella, ma avviso che non ho provato se funziona – il software che uso io e su cui si basano le piccole "guide" all'analisi che ho messo su Moodle è la versione 7.1.

Per scaricare la versione, sarà sufficiente andare sulla pagina di download. Il sito dovrebbe riconoscere direttamente il vostro sistema operativo e da qui potete iniziare a scaricare il file di setup. Nel caso il sistema operativo non sia corretto, selezionatelo manualmente.

# CCP4 Download pages

Mac OS X GNU/Linux MS Windows Source code

Here you can download the latest version of the CCP4 Software Suite, version 7.1, code name Skipton. See the [announcement](#) for further information. See also the [installation instructions](#) and [known issues](#).

## Binary downloads for MS Windows

The binary packages for Microsoft Windows are available below. These include [SHELX](#) and [WinCoot](#) (version 0.8.9.2) as optional components. If you are planning to install SHELX, please register and confirm your agreement to conditions of use at the SHELX web site. Note that the conditions are different for [academic](#) and [for-profit](#) users.

 +  + 	CCP4 Program Suite v7.1.000 including SHELX and COOT v0.8.9.2 (for 64-bit machines)	<a href="#">Download Now!</a>	Download size: 1363 MB Date: 22/04/2020
---	---	-------------------------------	--

Click [here](#) for the MD5 checksums of all files.



Science and Technology Facilities Council



Biotechnology and Biological Sciences Research Council

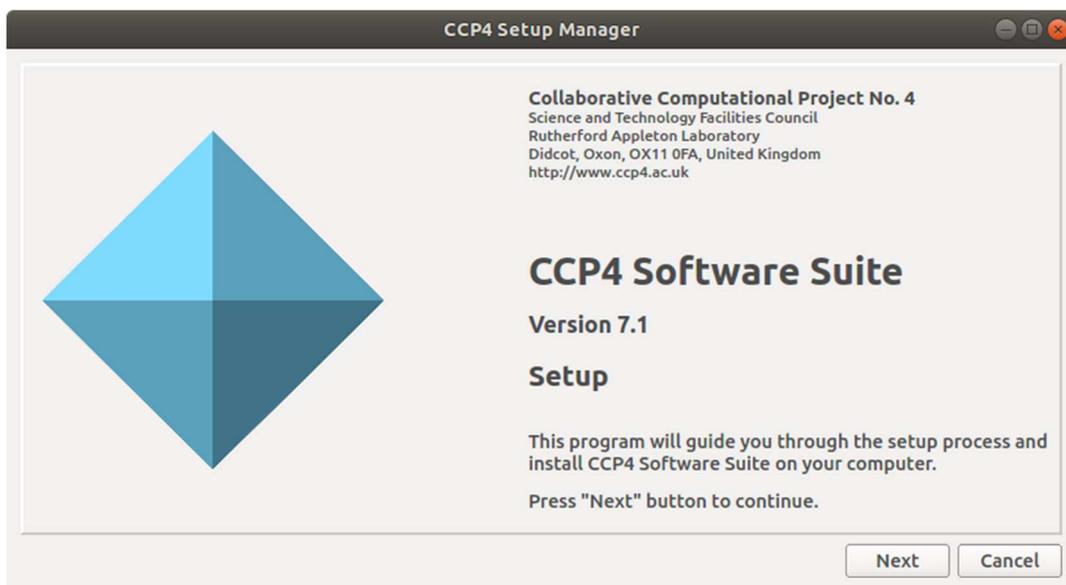


To try the latest version of the CCP4 Suite while still keeping the previous one, unpack the installer using 7z and run `ccp4i2.bat` or `ccp4i.bat`.

[Let us know](#) if anything does not work as expected.

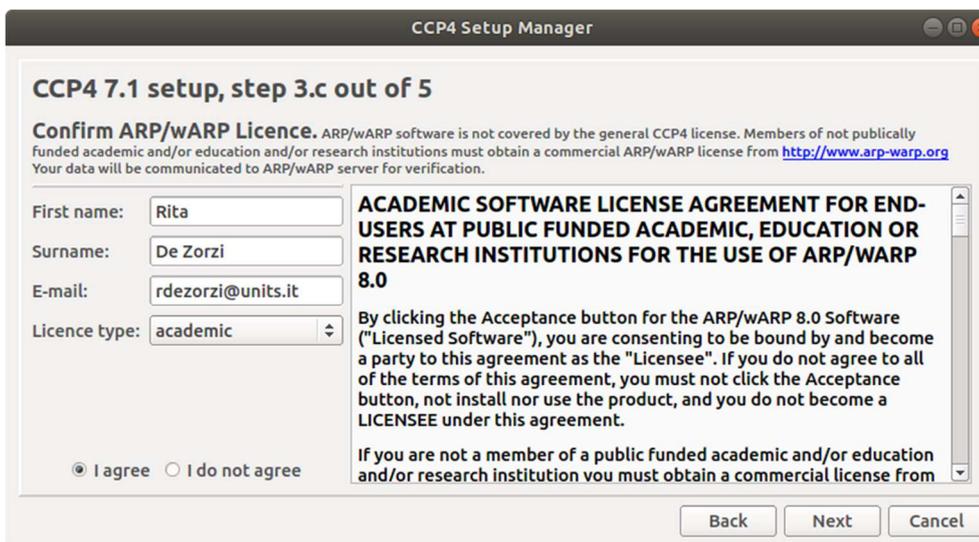
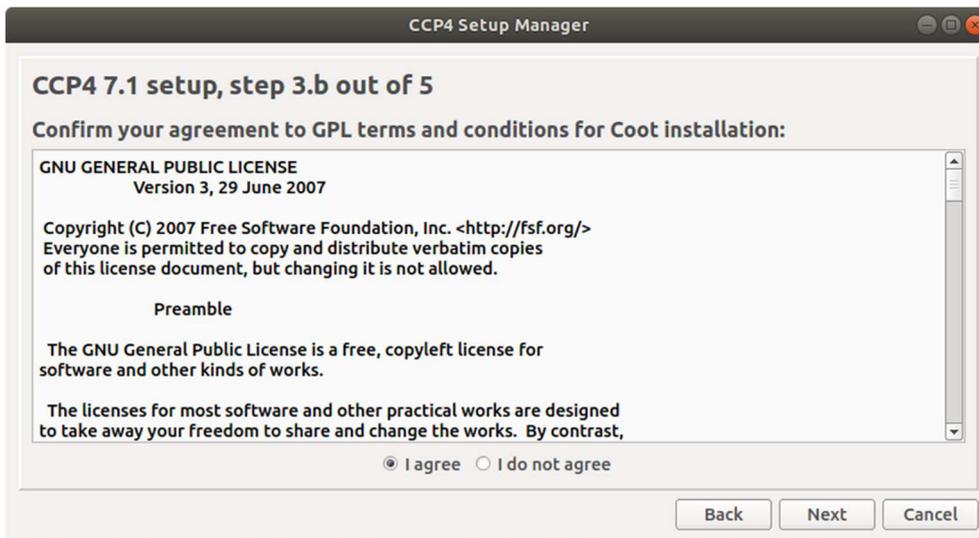
Una volta che il file è stato scaricato completamente, può essere avviato. Su Windows basta il doppio click sul file, che è un eseguibile. Su Linux è necessario estrarlo (il file scaricato è un tar.gz) e poi renderlo eseguibile (da terminale: `chmod 777 <nome del file>`). Attenzione: questo è un file di setup che permetterà il download degli eseguibili; perchè l'installazione venga completata sarà necessaria la connessione internet attiva fino al termine del download.

Quando il file si avvia, vi appare la seguente finestra (questo nell'installazione su Linux, ma quella in Windows dovrebbe essere molto simile):

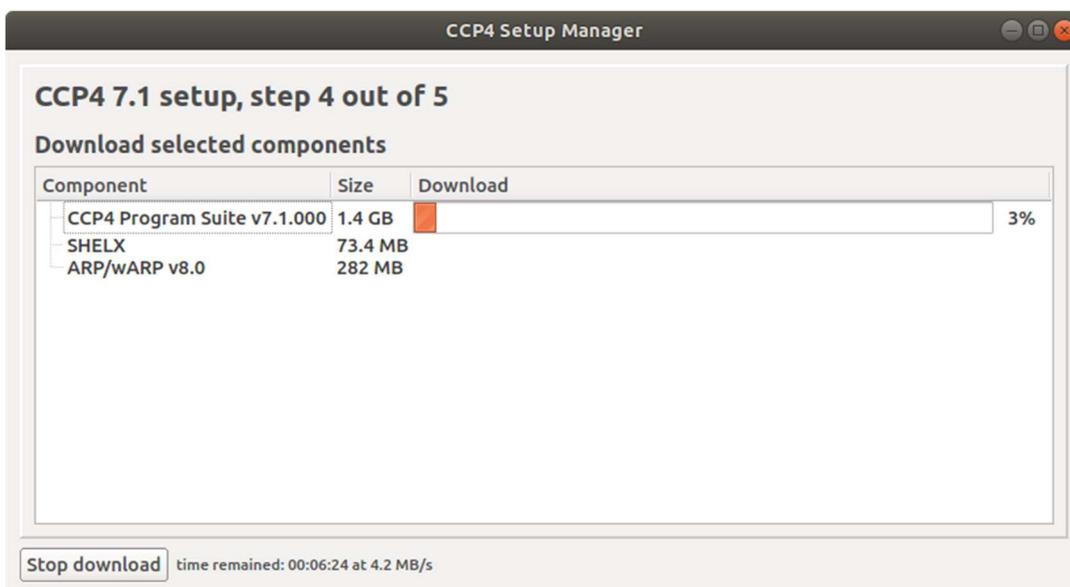


Potete selezionare Next.

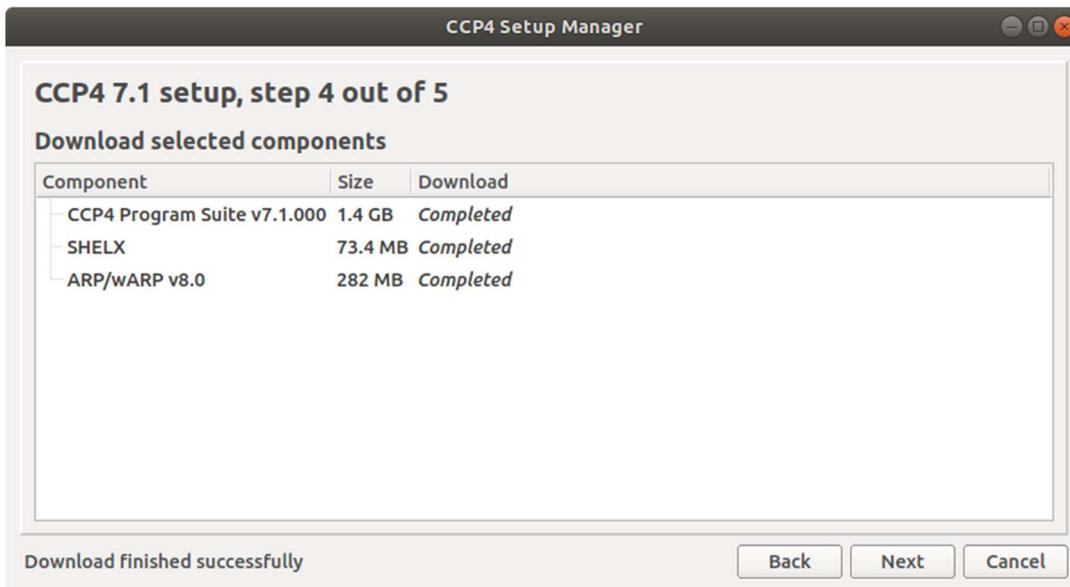




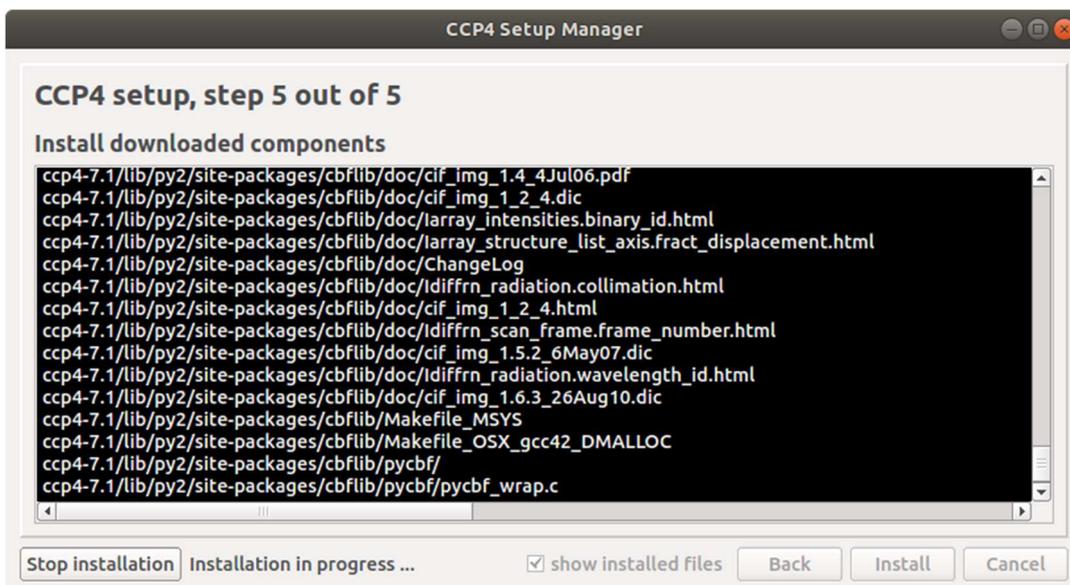
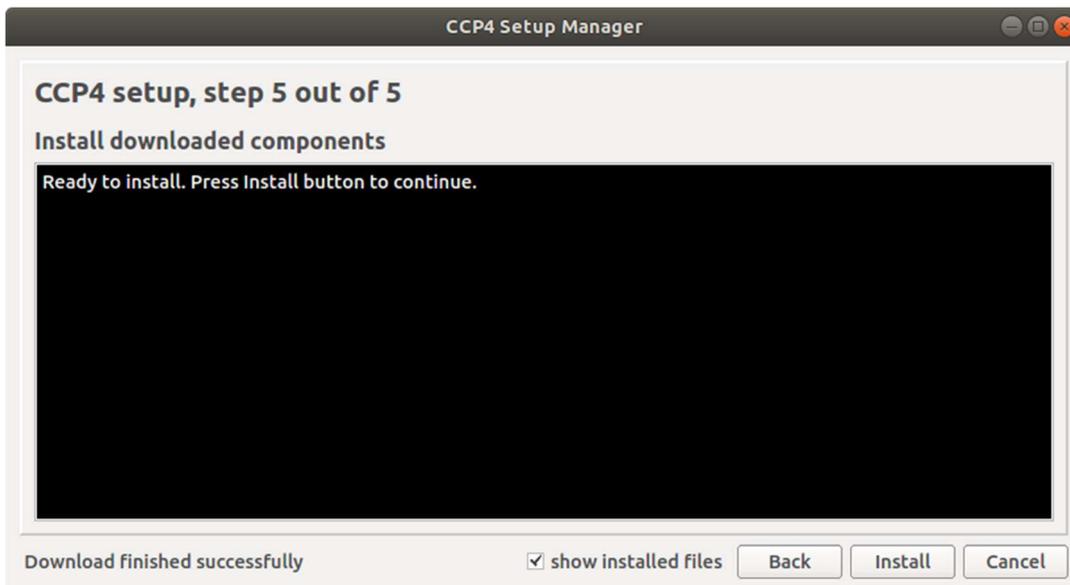
A questo punto il programma di setup esegue il download dei file necessari all'installazione:



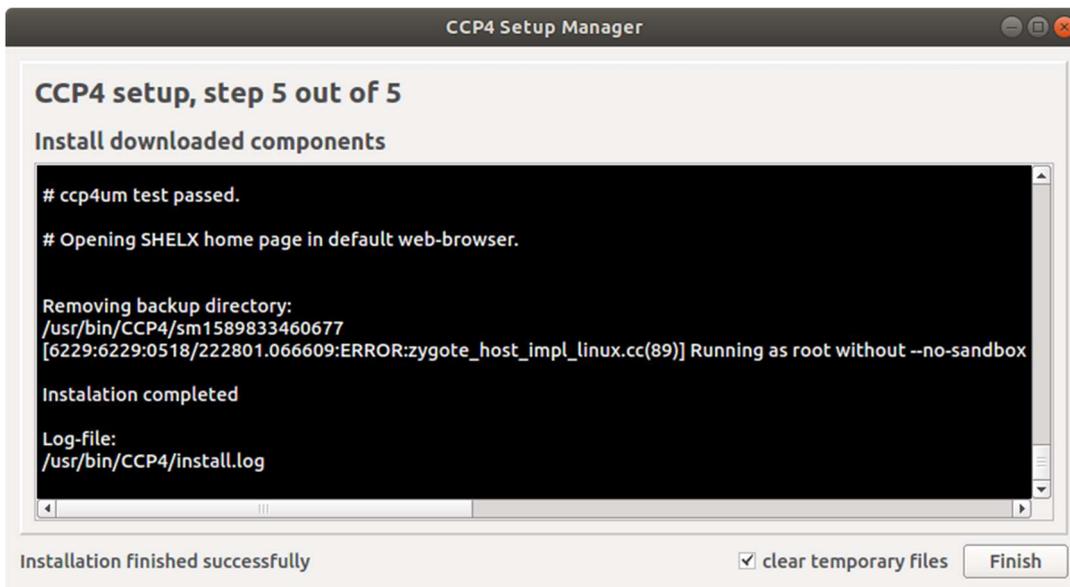
(Sulla vostra schermata non apparirà SHELX).



Siete pronti per iniziare l'installazione! Proseguite sulla finestra successiva con Install:



L'installazione dura un po'... A me ci sono voluti circa 20 minuti per Windows, ma solo 5 minuti per Linux. Ma immagino che questo dipenda dalla specifica macchina.



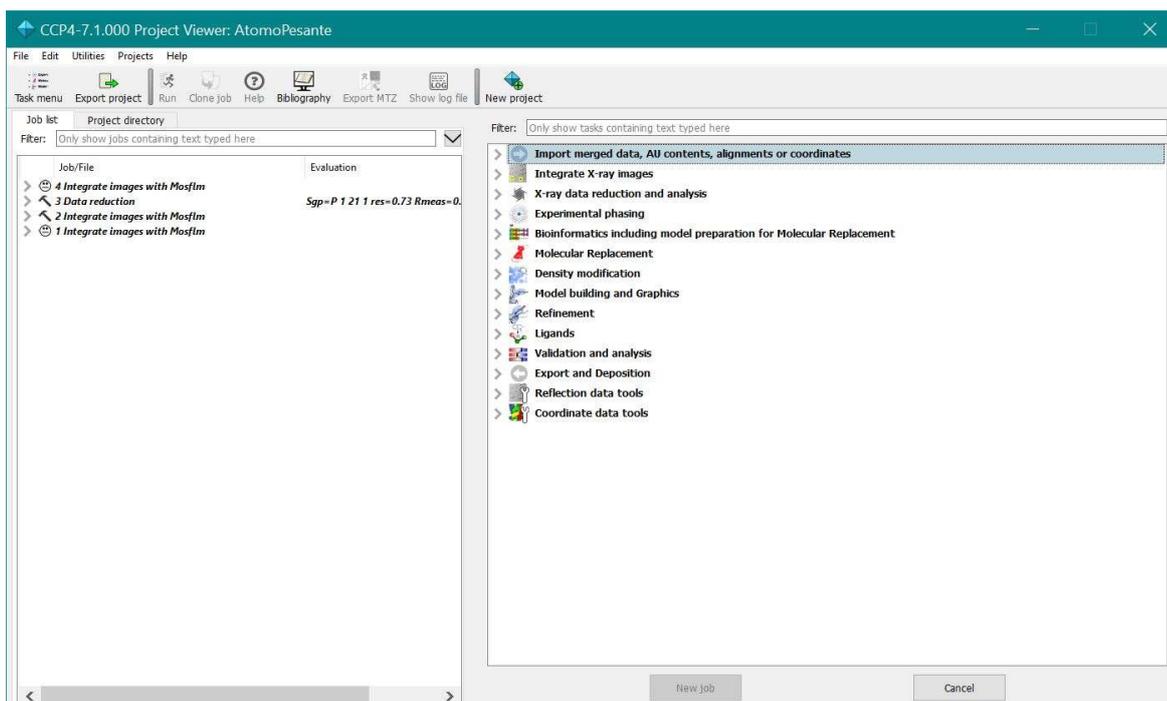
Una volta terminata l'installazione potete chiudere il programma di setup con il pulsante Finish.

Il programma dovrebbe aver creato sul vostro Desktop le icone di CCP4i, CCP4i2 e Coot:

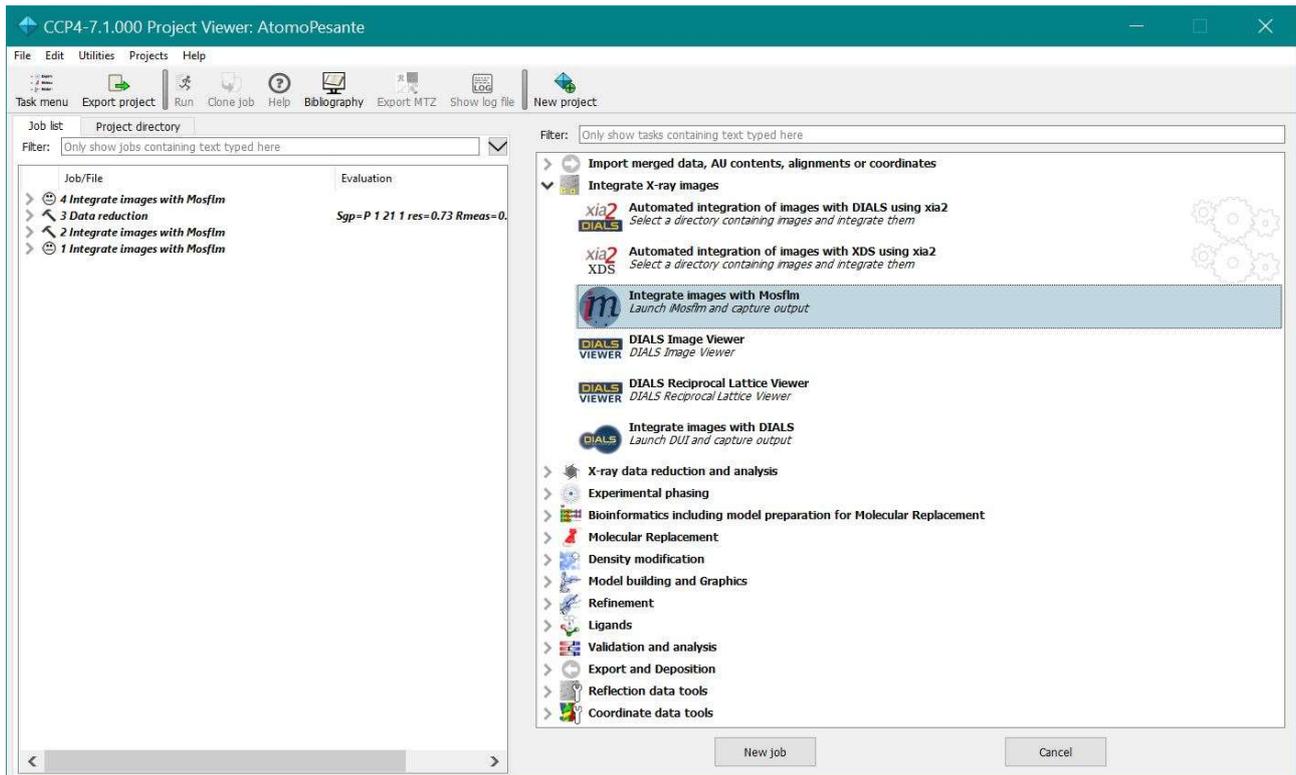


Al termine dell'installazione è opportuno riavviare il computer.

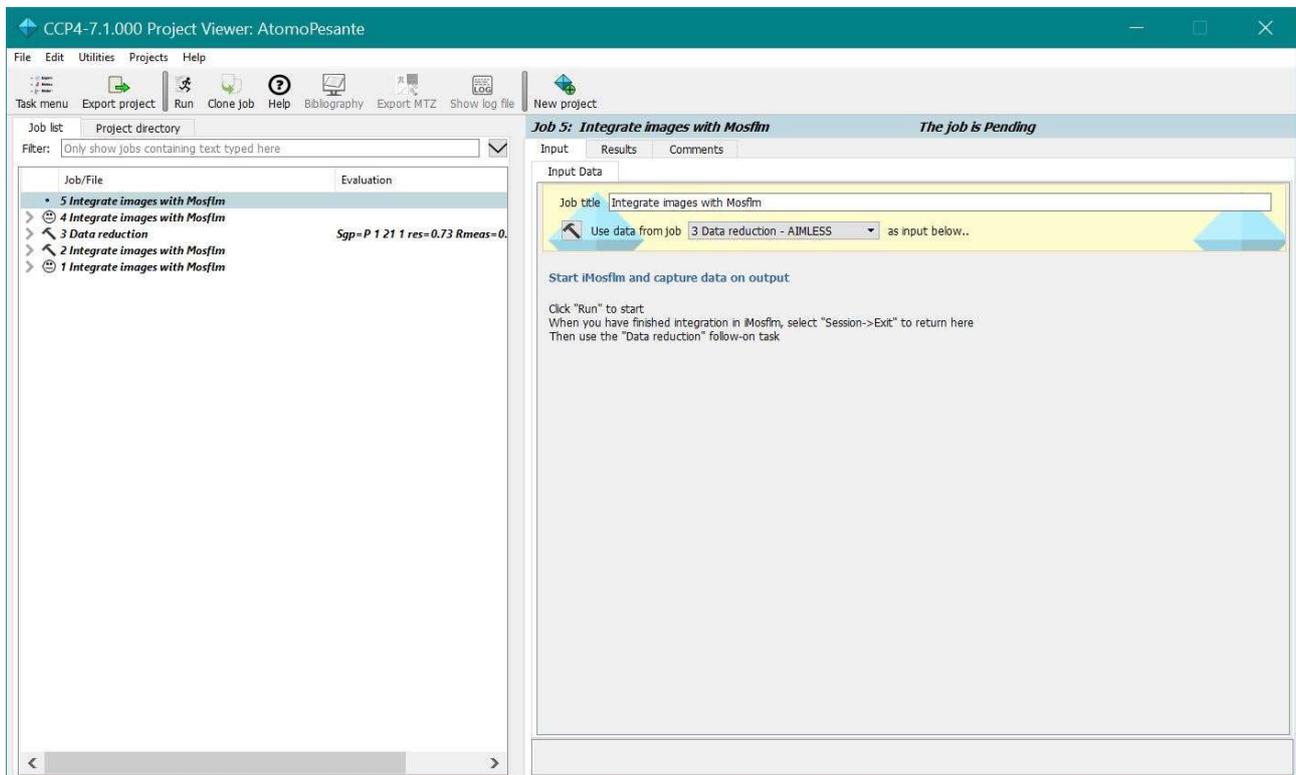
Qualche ulteriore step permette di verificare che i programmi funzionino nel modo corretto. Cominciamo verificando CCP4i2. Quando aprite il programma dovrete visualizzare questa finestra:



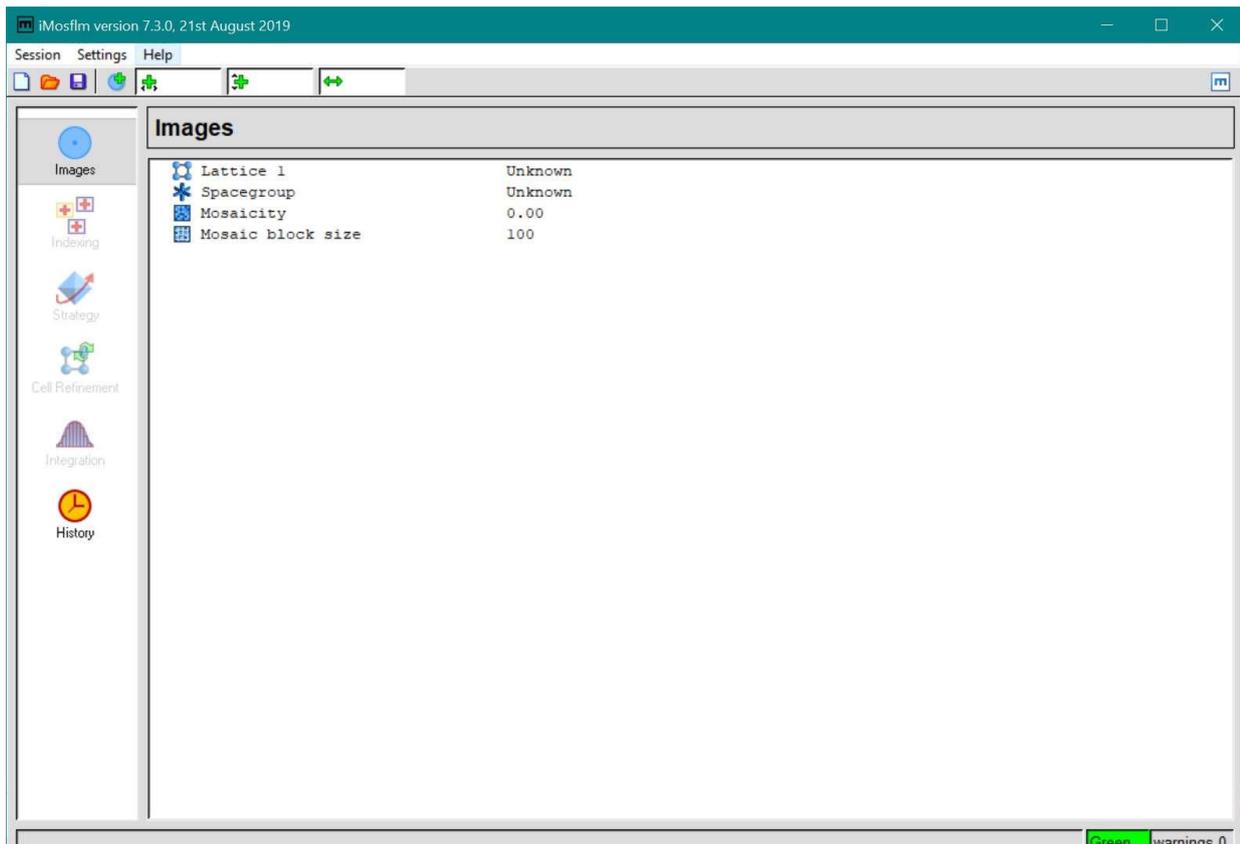
Da qui scegliete “Integrate X-ray images” (seconda voce sulla destra).



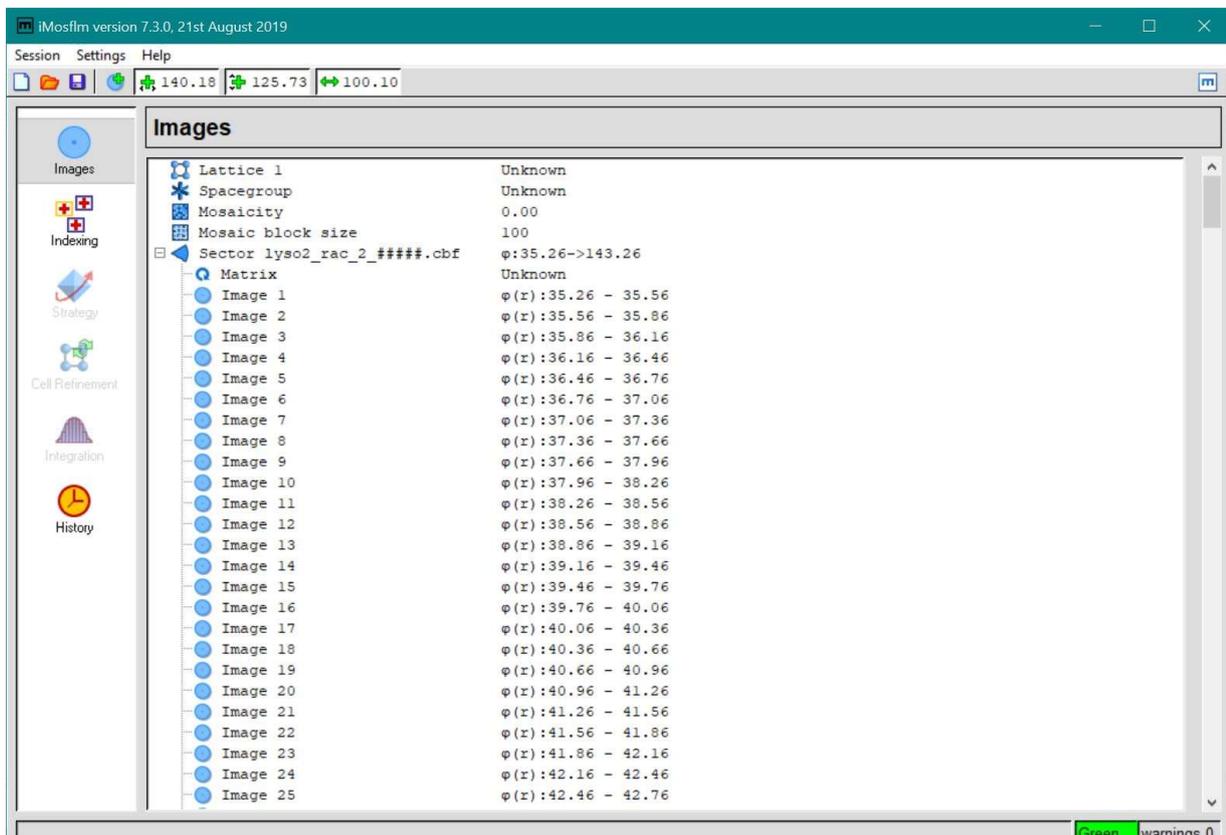
Nel menù che si apre, selezionate “Integrate images with Mosflm” (doppio click).



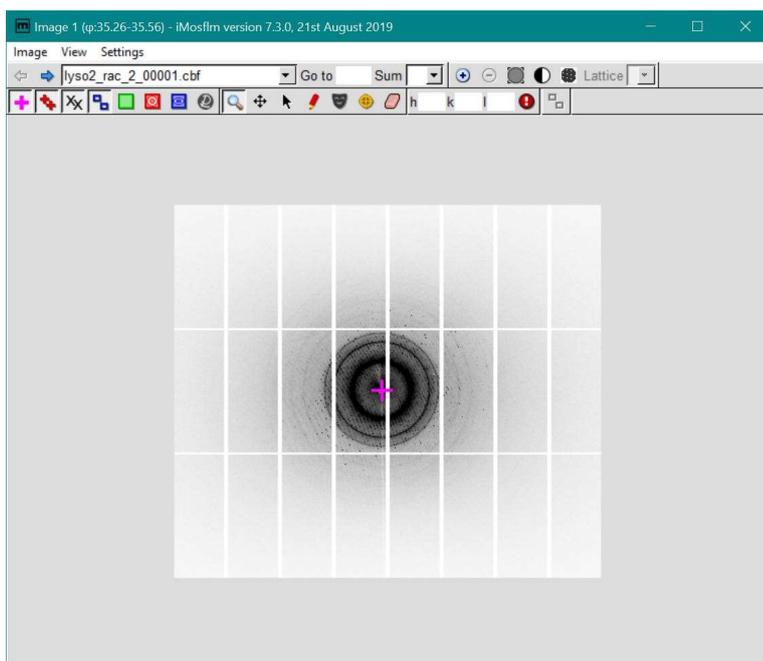
Premete il pulsante Run (terzo pulsante in alto, con l’omino che corre). Dovrebbe aprirsi un’altra finestra, quella del software Mosflm che ci servirà per indicizzazione e integrazione delle immagini di diffrazione.



Selezionate il pulsante per l'aggiunta delle immagini (terzo pulsante in alto, con un diffrattogramma con il segno +) e caricate le immagini di lisozima che avete scaricato. Vi basterà selezionare un'immagine qualsiasi della raccolta dati che il software automaticamente caricherà tutte le 720 immagini presenti nella cartella.

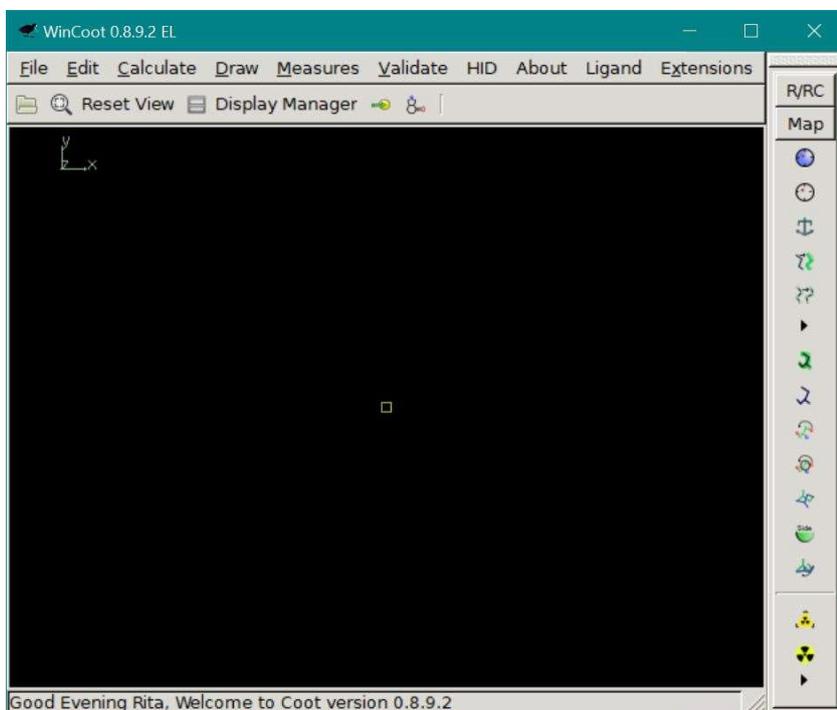


Allo stesso tempo si apre una finestra con l'immagine di diffrazione:



Se siete arrivati qui, Mosflm dovrebbe essere stato installato con successo.

Controlliamo anche l'installazione di Coot. Fate doppio click sulla relativa icona. Dovrebbe aprirsi la finestra del programma, dopo una prima immagine di una folaga (coot in inglese). Ci mette un po', abbiate pazienza.



Se siete arrivati qui anche Coot dovrebbe essere a posto.

Se siete arrivati qui tutto ha funzionato! In caso contrario, mandatemi una mail: [rdezorzi@units.it](mailto:rdezorzi@units.it)

In alternativa, ho anche messo su Moodle un link ad una vecchia versione di CCP4 che spero possa essere ancora scaricabile e utilizzabile.