

Preparazione per le esercitazioni del Corso di Biocristallografia e Microscopia Elettronica

Anno accademico 2024/25

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 link che è disponibile su Moodle. Ciascun file delle immagini ha una dimensione di circa 6 MB, ma sono contenuti in una cartella compressa.

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). Al momento l'ultima versione è la 9.0. Queste istruzioni però sono state scritte per la versione 8.0 – spero che i cambiamenti nel setup non siano significativi.

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

[macOS](#) [GNU/Linux](#) **[MS Windows](#)** [MS Windows - Subsystem for Linux](#) [Source code](#)

Here you can download the latest version of the CCP4 Software Suite, version 8.0, code name Addingham. See the [announcement](#) for further information. See also the [installation instructions](#) for details on installing CCP4.

Binary downloads for MS Windows

The binary packages for Microsoft Windows are available below. These include [SHELX](#) and [WinCoot](#) (version 0.9.8.92) 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.

Issues have previously been reported when using CCP4 software, while having Avast AV running on Windows systems. We therefore recommend using the default Windows Defender software as an alternative when installing or using CCP4 software.

 +  + 	CCP4 Program Suite v8.0.012 + SHELX + COOT v0.9.8.92 (exe)	Download Now!  Download size: 2008 MB Date: 13/06/2023
 +  + 	CCP4 Program Suite v8.0.019 + SHELX + COOT v0.9.8.92 (zip)	Download Now!  Download size: 3099 MB Date: 11/04/2024
	Cloud Tutorials	Download Now!  Download size: 2391 MB Date: 24/04/2022
	COOT v0.9.8.92	Download Now!  Download size: 242 MB Date: 03/10/2023

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

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.



Science and Technology Facilities Council
 Rutherford Appleton Laboratory
 Didcot, Oxon, OX11 0FA, United Kingdom
<http://www.ccp4.ac.uk>



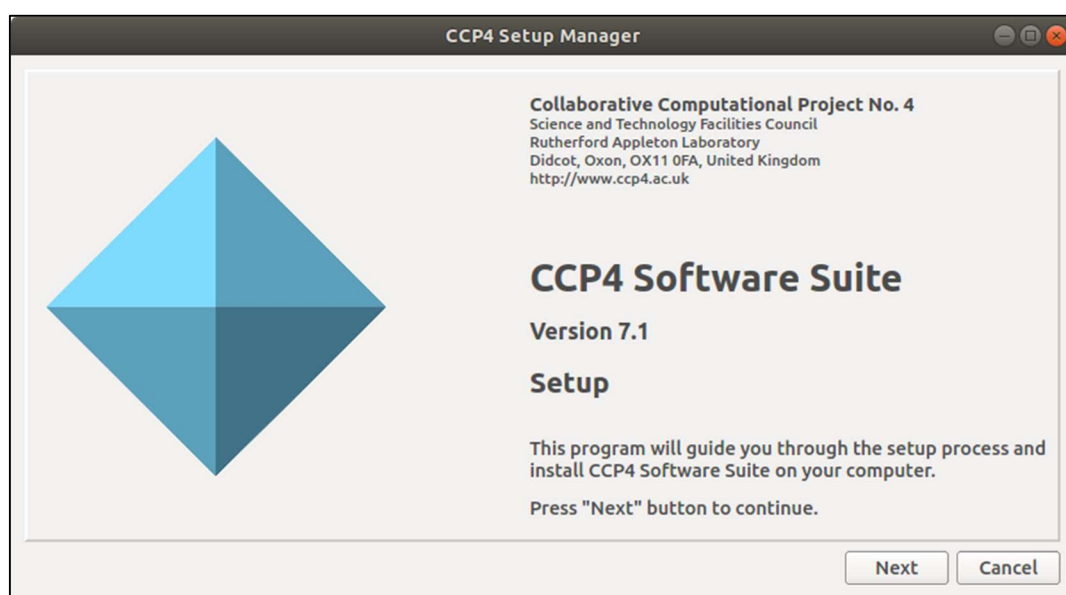
Biotechnology and Biological Sciences Research Council



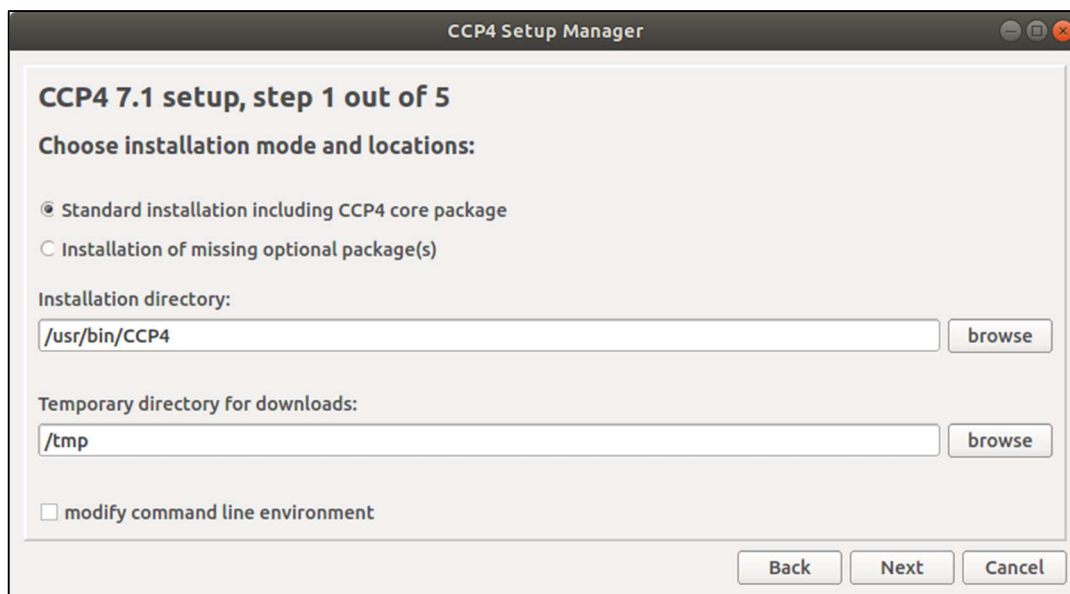


Una volta che il file è stato scaricato completamente, può essere avviato. Su Windows basta il doppio click sul file, che è un eseguibile. Su Linux è necessario estrarlo (il file scaricato è un tar.gz) e poi renderlo eseguibile (da terminale: `chmod 777 <nome del file>`). Attenzione: questo è un file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

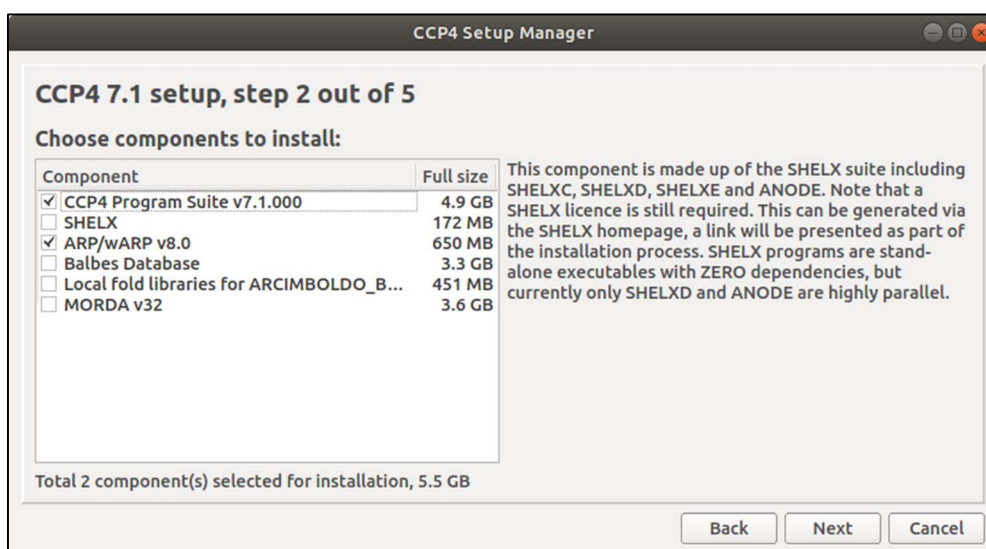
Quando il file si avvia, vi appare la seguente finestra (questo nell'installazione su Linux di una versione più vecchia, ma quella in Windows della nuova versione dovrebbe essere molto simile):



Potete selezionare Next.

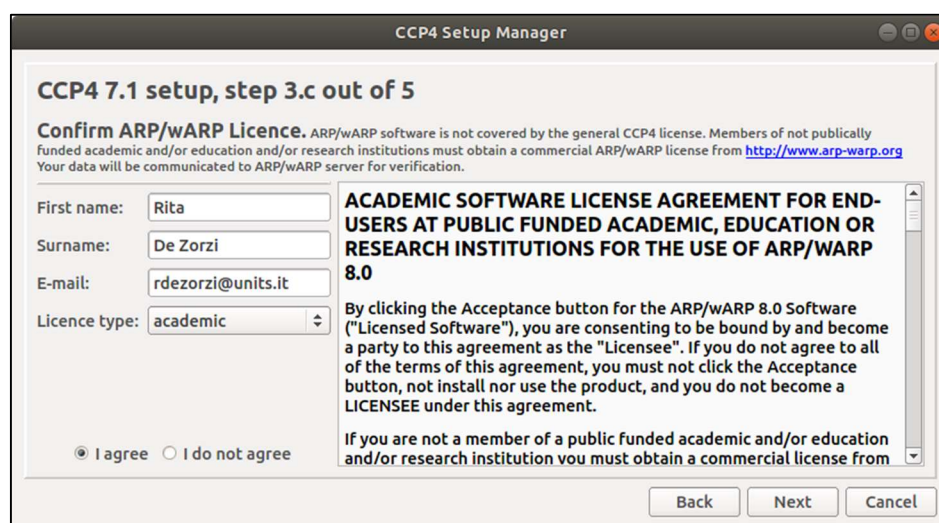
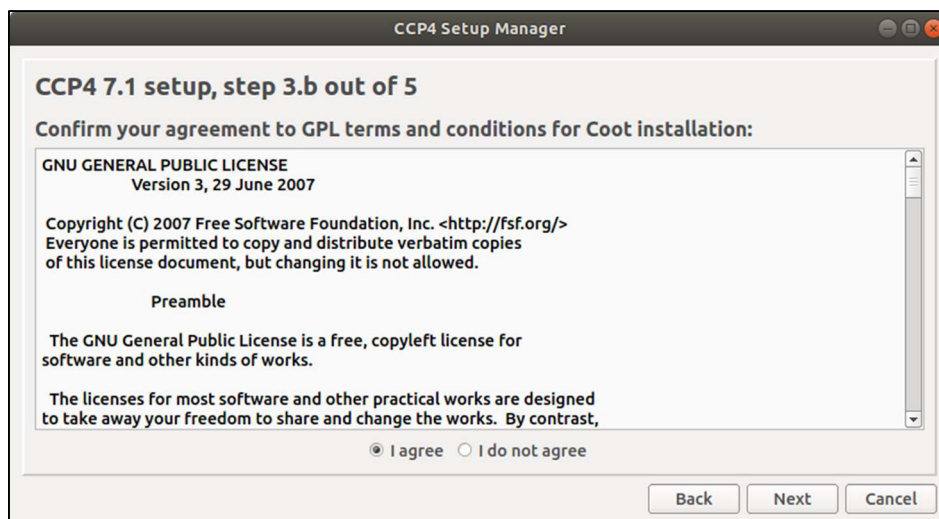


A questo punto potete selezionare l'installazione standard e mettere il file nella cartella che preferite.

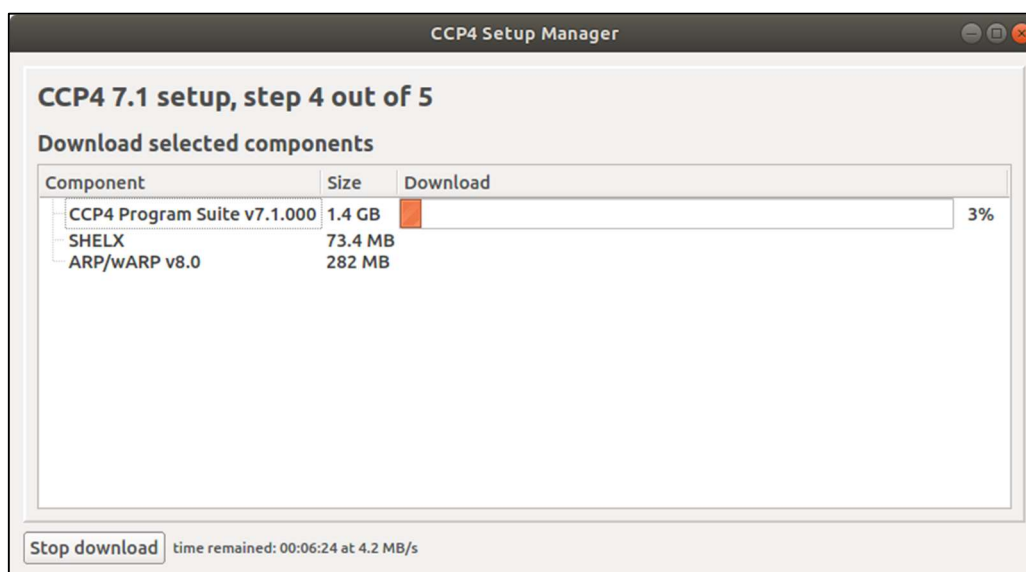


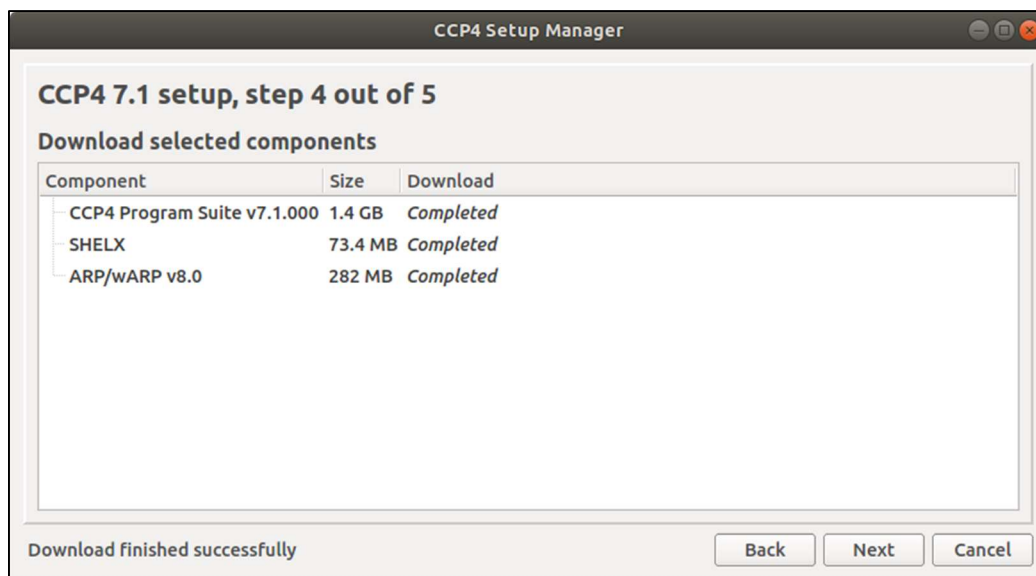
In questa schermata selezionate i software che vi interessa scaricare. I software che ci servirà di installare sono: iMosflm, CCP4 Program Suite, ARP/wARP e Coot. Selezionate quelli che vedete nell'elenco e proseguite con Next.

Da qui in poi ci sono le licenze dei diversi software. Accettate sempre e proseguite. Per la licenza di ARP/wARP potete mettere la vostra mail istituzionale.

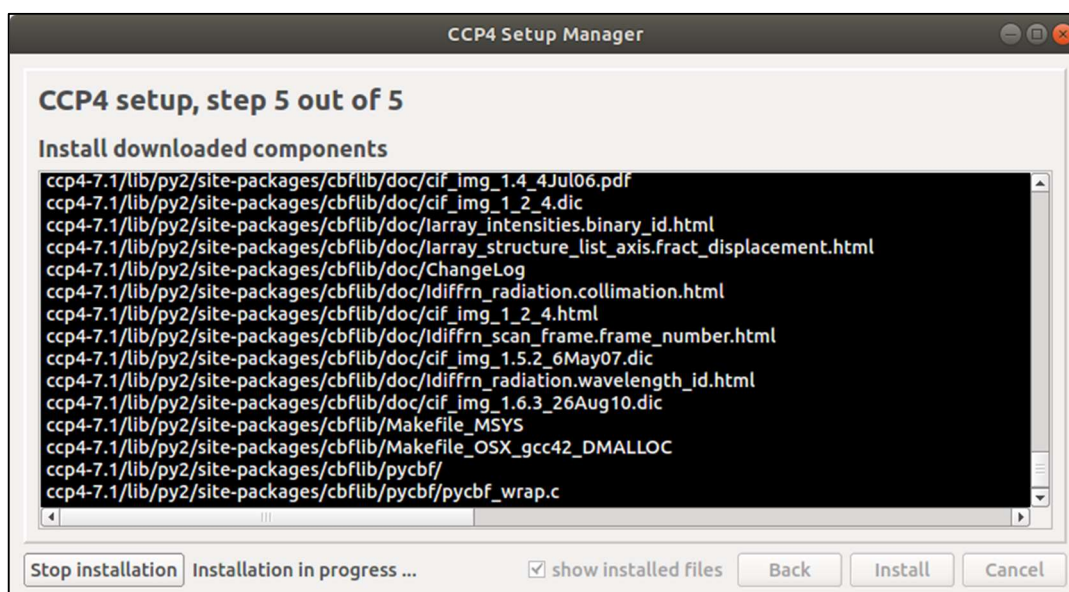
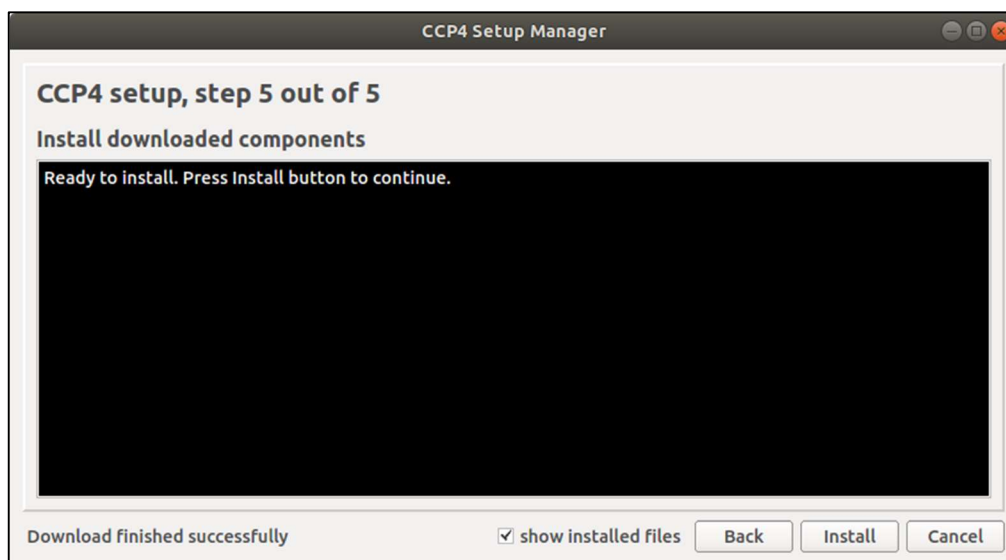


A questo punto il programma di setup esegue il download dei file necessari all'installazione:

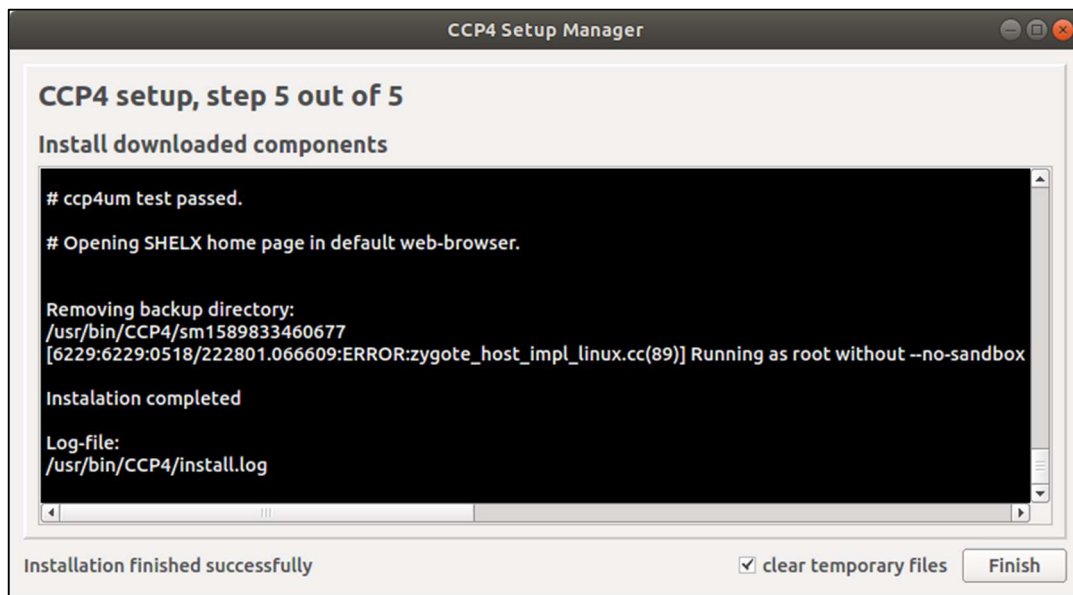




Siete pronti per iniziare l'installazione! Proseguite sulla finestra successiva con Install:



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.

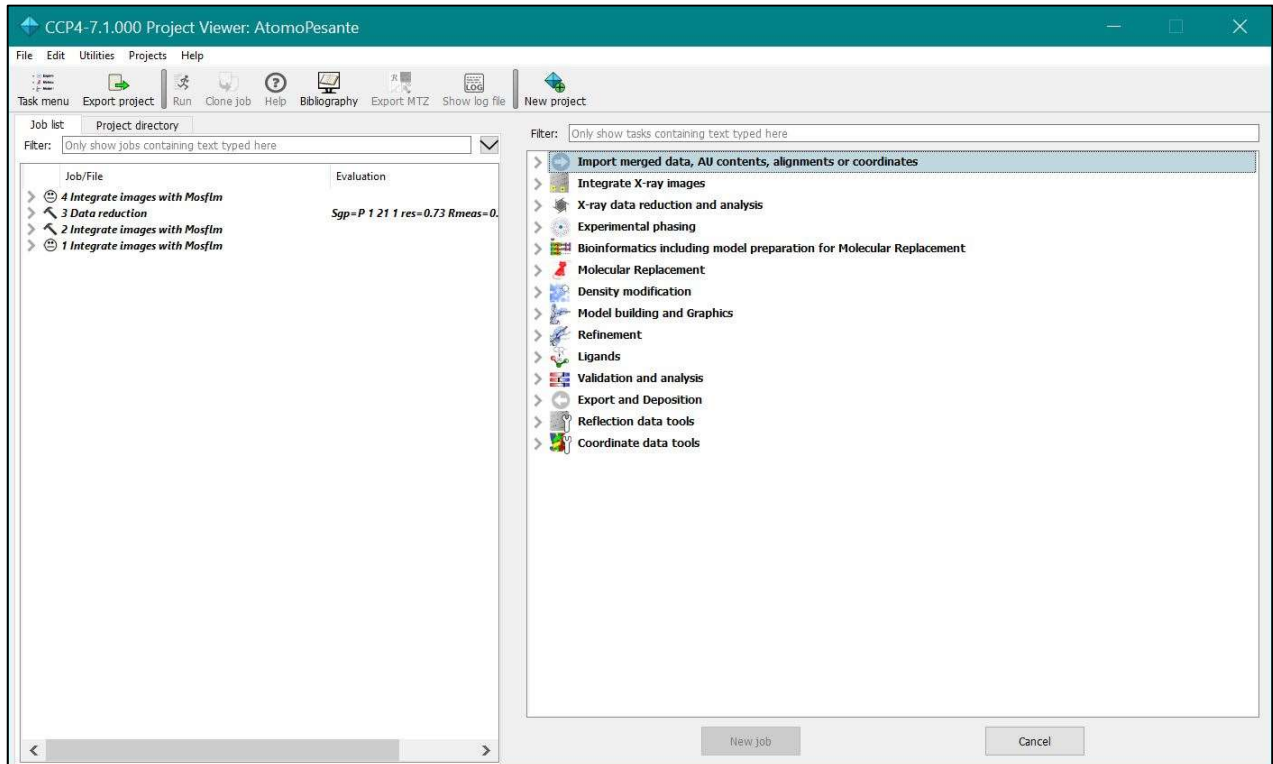
Il programma dovrebbe aver creato sul vostro Desktop le icone di CCP4i, CCP4i2 e Coot:



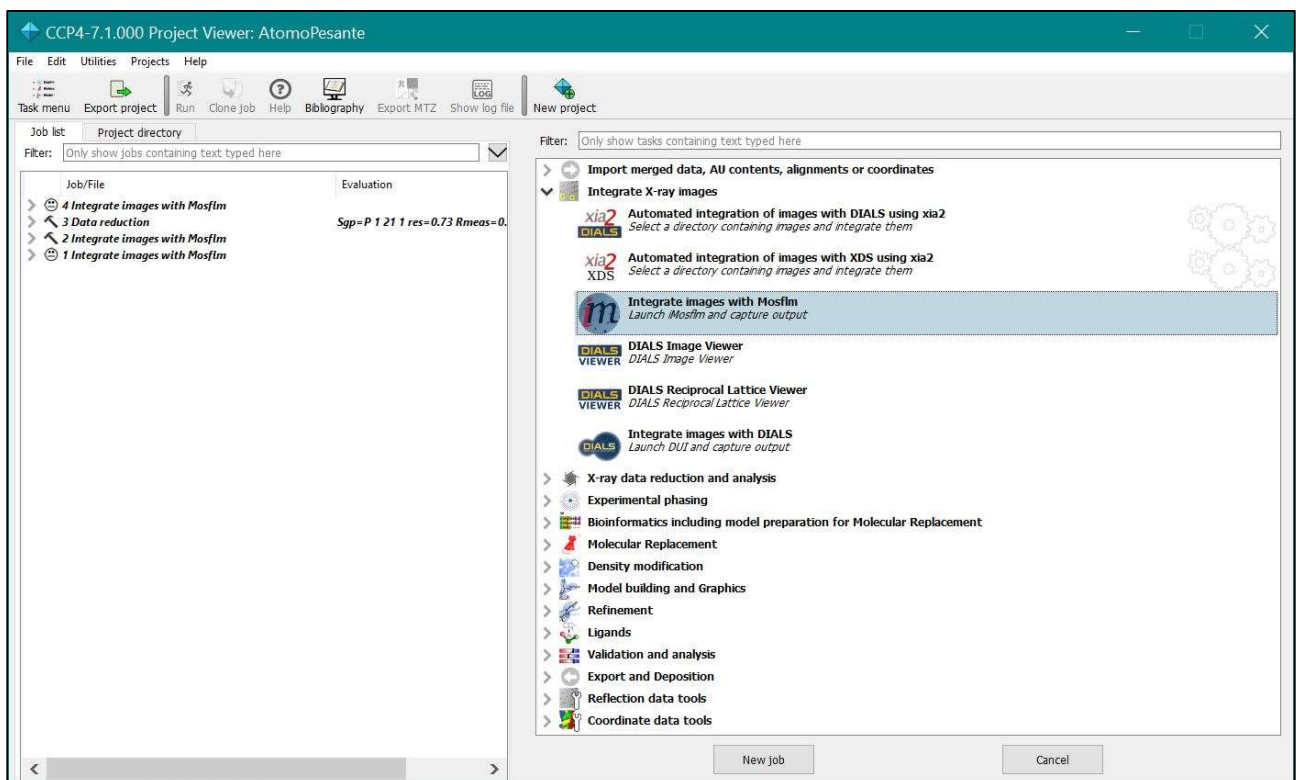
Al termine dell'installazione è opportuno riavviare il computer.

Verifica dell'installazione

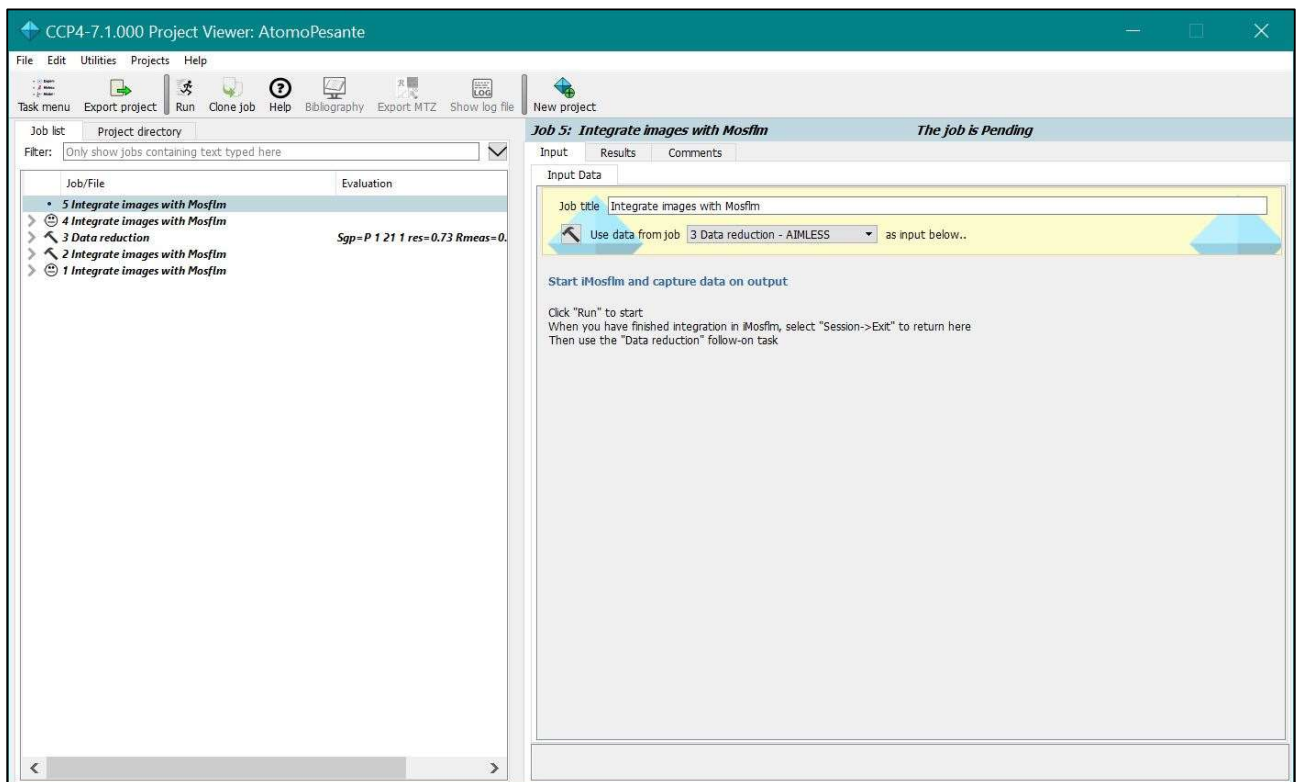
Qualche ulteriore step permette di verificare che i programmi funzionino nel modo corretto. Per questa verifica sono necessarie le immagini di diffrazione che dovrete aver già scaricato. Cominciamo verificando CCP4i2 (icona centrale qui sopra). Quando aprite il programma dovrete visualizzare questa finestra:



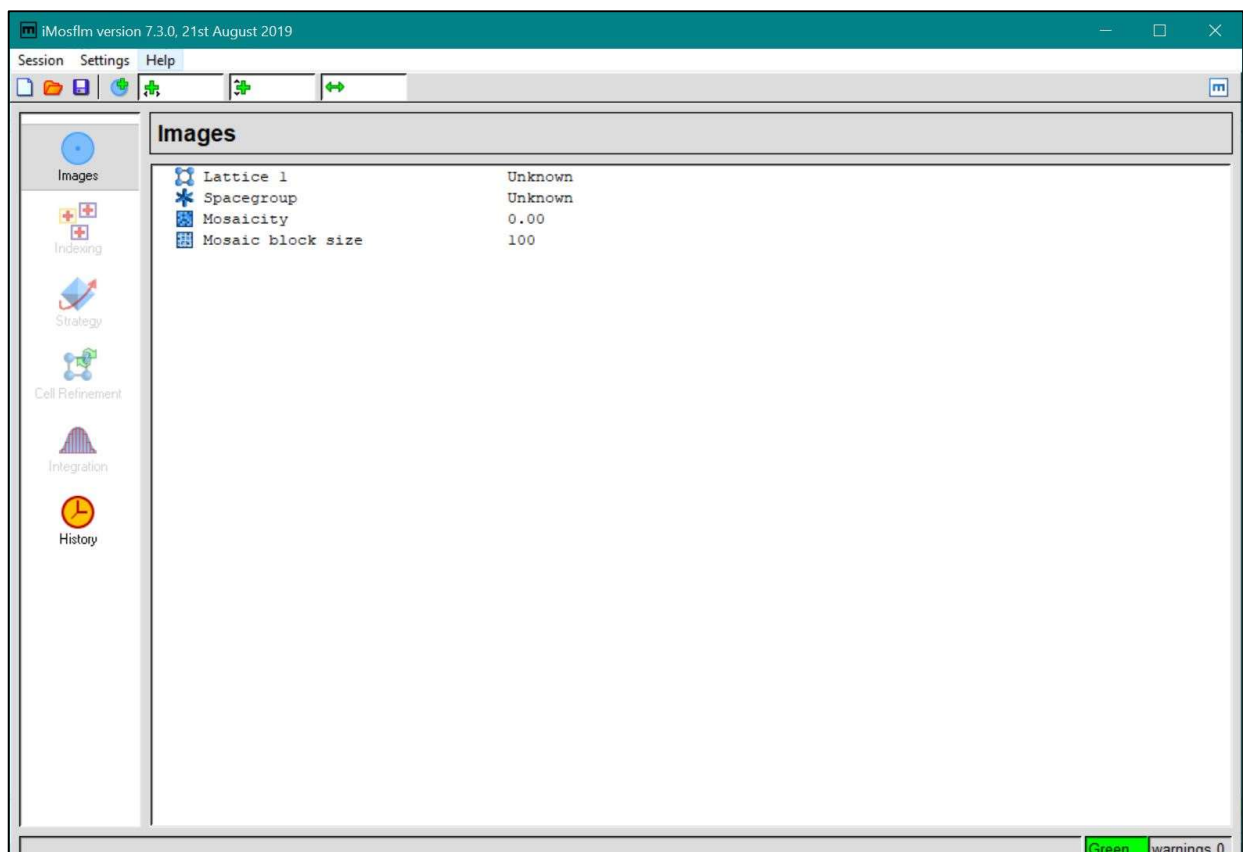
Da qui scegliete “Integrate X-ray images” (seconda voce sulla destra).



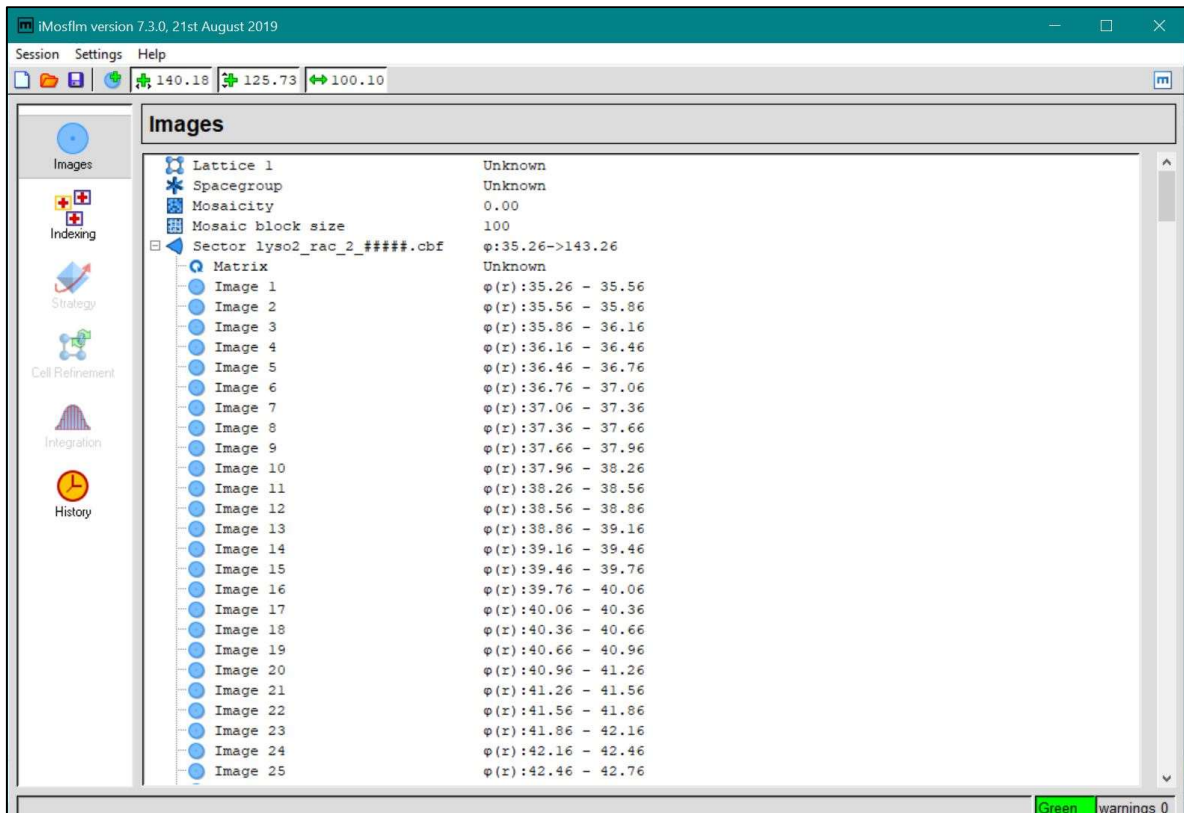
Nel menù che si apre, selezionate “Integrate images with Mosflm” (doppio click).



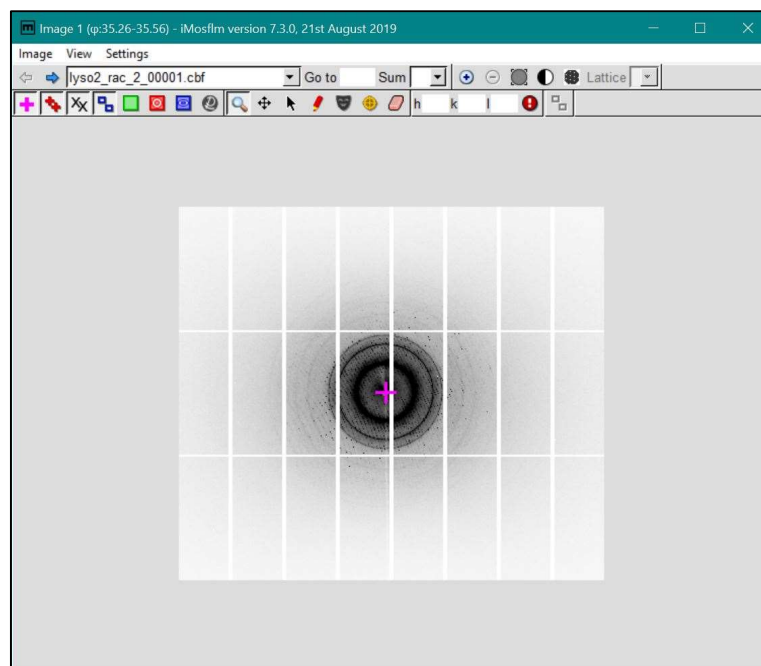
Premete il pulsante Run (terzo pulsante in alto, con l’omino che corre). Dovrebbe aprirsi un’altra finestra, quella del software Mosflm che ci servirà per indicizzazione e integrazione delle immagini di diffrazione.



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.

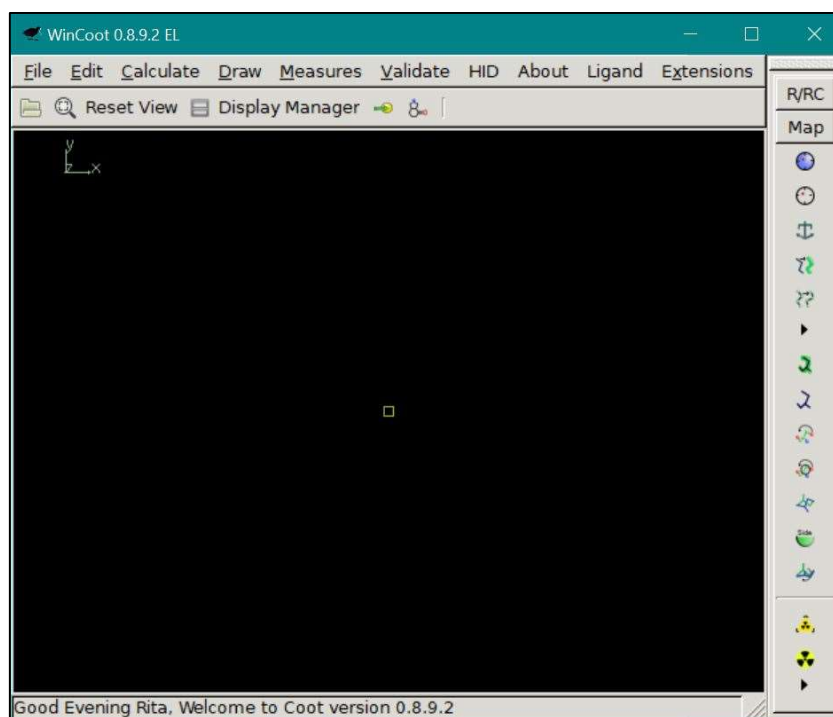


Allo stesso tempo si apre una finestra con l'immagine di diffrazione:



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) e se necessario vi fornisco una vecchia versione dei software.