



Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο



ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ

Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗΣ ΑΕΙ ΓΙΑ ΤΗΝ ΕΠΙΚΑΙΡΟΠΟΙΗΣΗ ΓΝΩΣΕΩΝ ΑΠΟΦΟΙΤΩΝ ΑΕΙ (ΠΕΓΑ)

«Οι σύγχρονες τεχνικές βιο-ανάλυσης στην υγεία, τη γεωργία, το περιβάλλον και τη διατροφή»

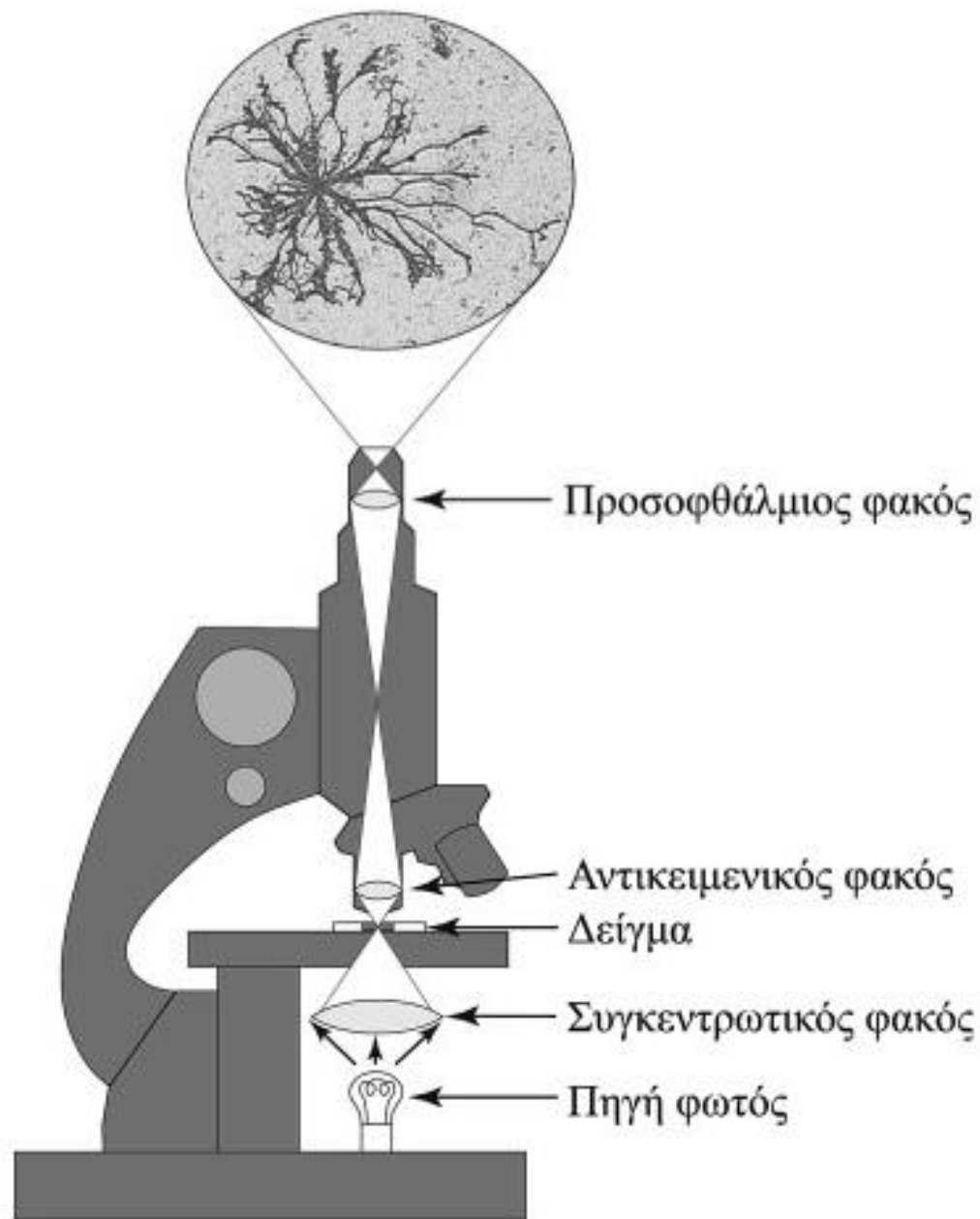
Βλέποντας τα πράγματα με ένα διαφορετικό φως. Πως η κρυσταλλογραφία ακτίνων Χ αποκαλύπτει τη δομή βιολογικών μορίων.

Δημ. Δ. Λεωνίδας

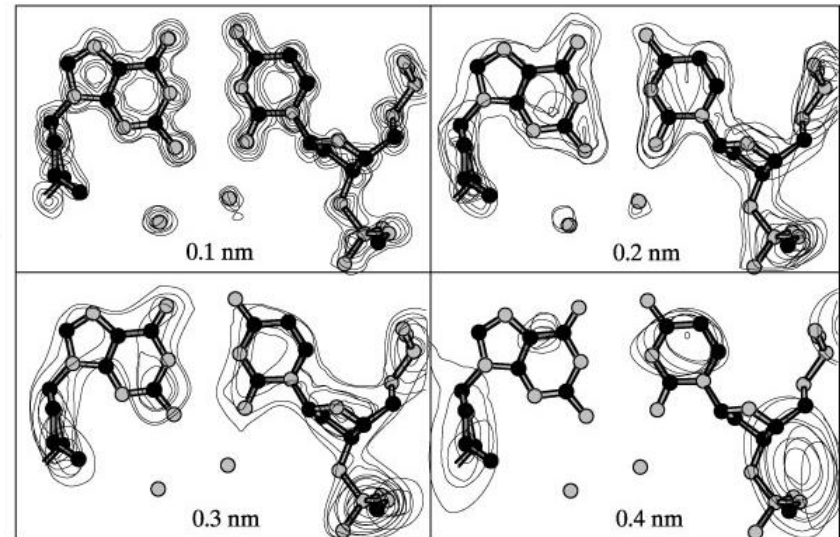
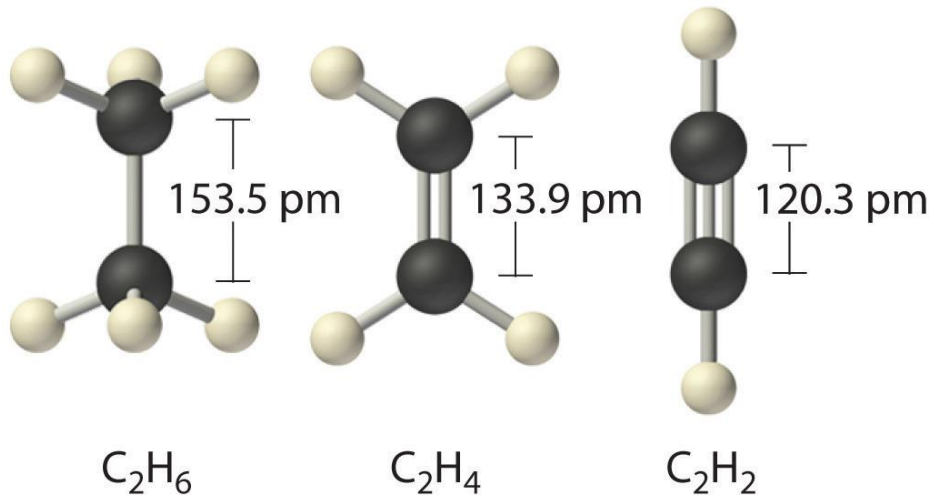
Τμήμα Βιοχημείας και Βιοτεχνολογίας

Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας

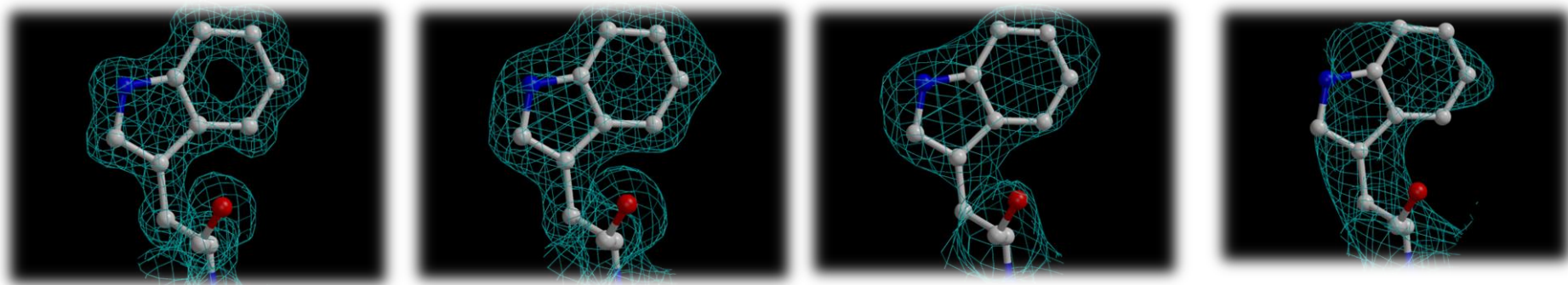
ddleonidas@bio.uth.gr

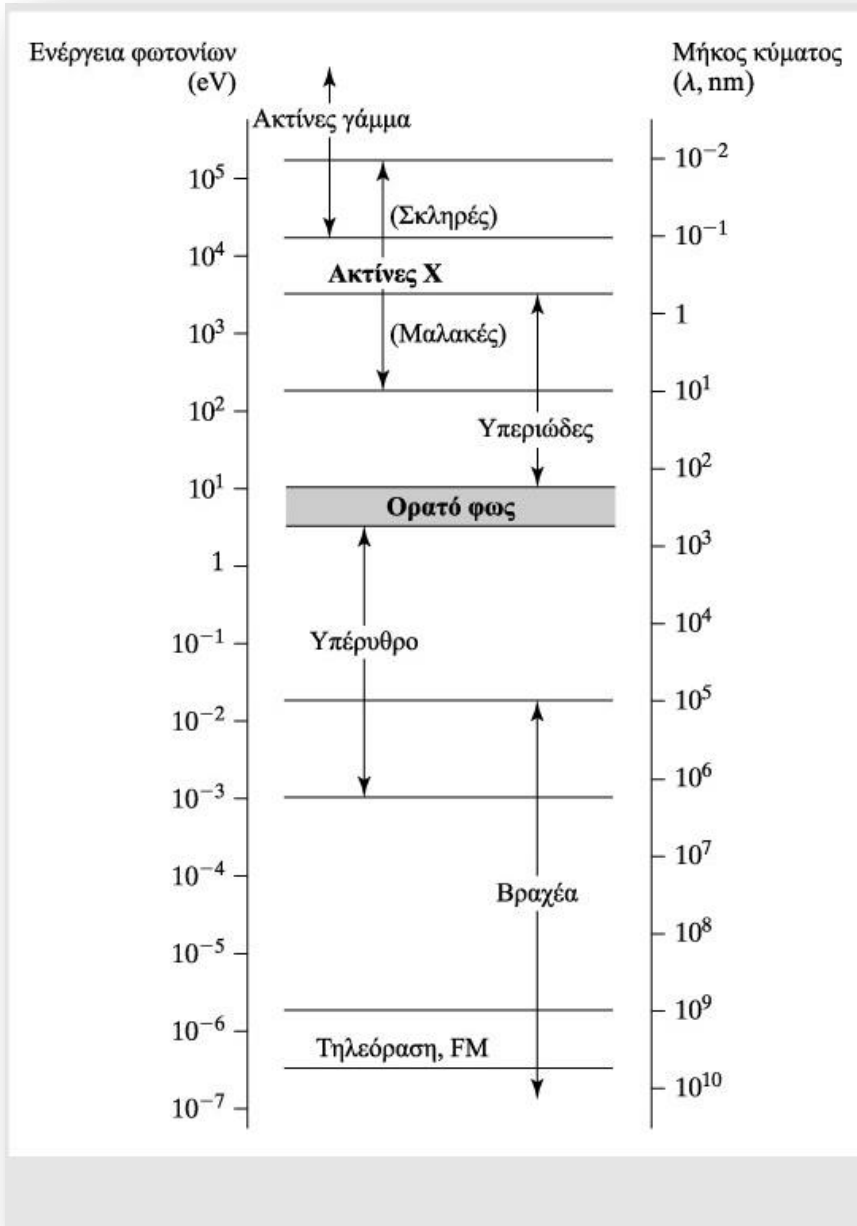


Μέσος όρος 0.136 nm



$$LR \cong \frac{\lambda}{2}$$





$$LR \cong \frac{\lambda}{2}$$

ΧΗΜ. (α) κάθε στερεό σώμα με υψηλή κρυσταλλικότητα (β) **κρύσταλλοι λουτρού** οι αρωματικές κρυσταλλικές ενώσεις, που κυκλοφορούν υπό μορφήν κόκκων ή σκόνης, και που χρησιμοποιούνται για να αρωματίζουν το νερό τού λουτρού **3. υγροί κρύσταλλοι** υλικό που χαρακτηρίζεται από ρευστότητα και ταυτόχρονα τα μόριά του έχουν κανονική διάταξη στον χώρο· χρησιμοποιούνται σε ηλεκτρονικές συσκευές: οθόνη υγρών κρυστάλλων.

[ETYM. < αρχ. κρύσ-τ-αλλος (με ανερμήνευτη παρέκταση -τ- και αναδιπλασιασμένο επίθημα -αλλος) < κρύος (< *κρύσ-ος, βλ.λ.), οπότε η λ. κρύσταλλος θα σήμαινε τον «διαυγή πάγο». Η λ. πέρασε μέσω τού λατ. *crystallus* και σε άλλες γλώσσες, λ.χ. αγγλ. *crystal*, γαλλ. *cristal*, γερμ. *Kristall* κ.ά. Οι επιστημονικοί όροι είναι μεταφρ. δάνεια: κρύσταλλοι λουτρού (< αγγλ. *bath crystals*), υγροί κρύσταλλοι (< αγγλ. *liquid crystals*)].

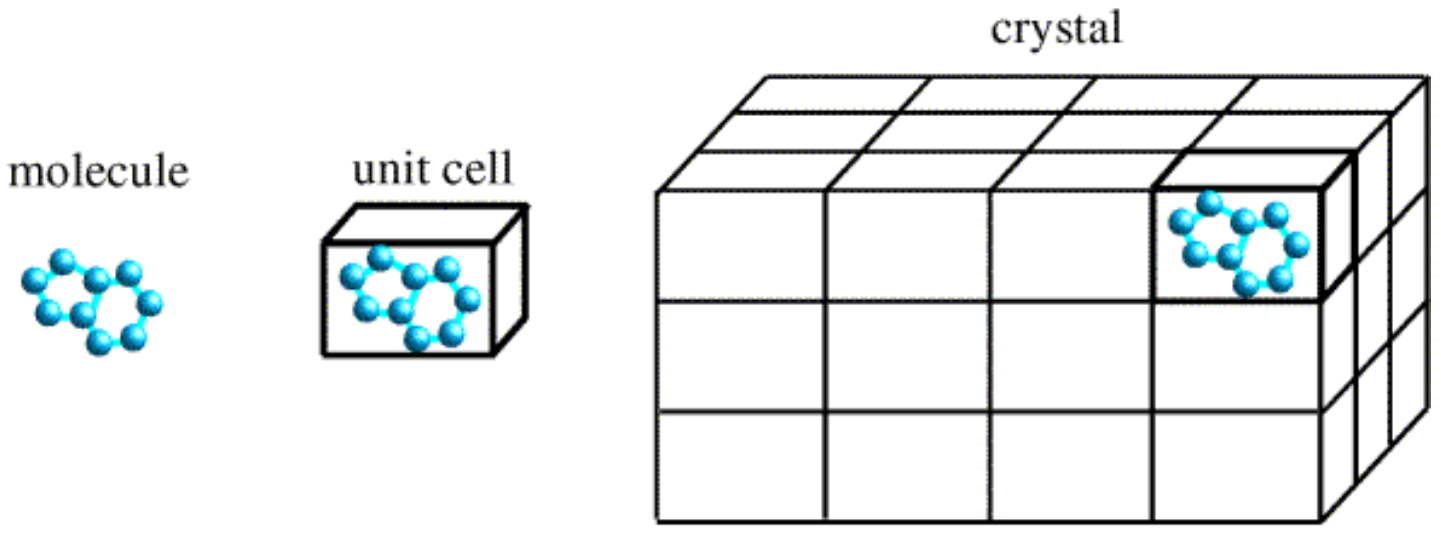
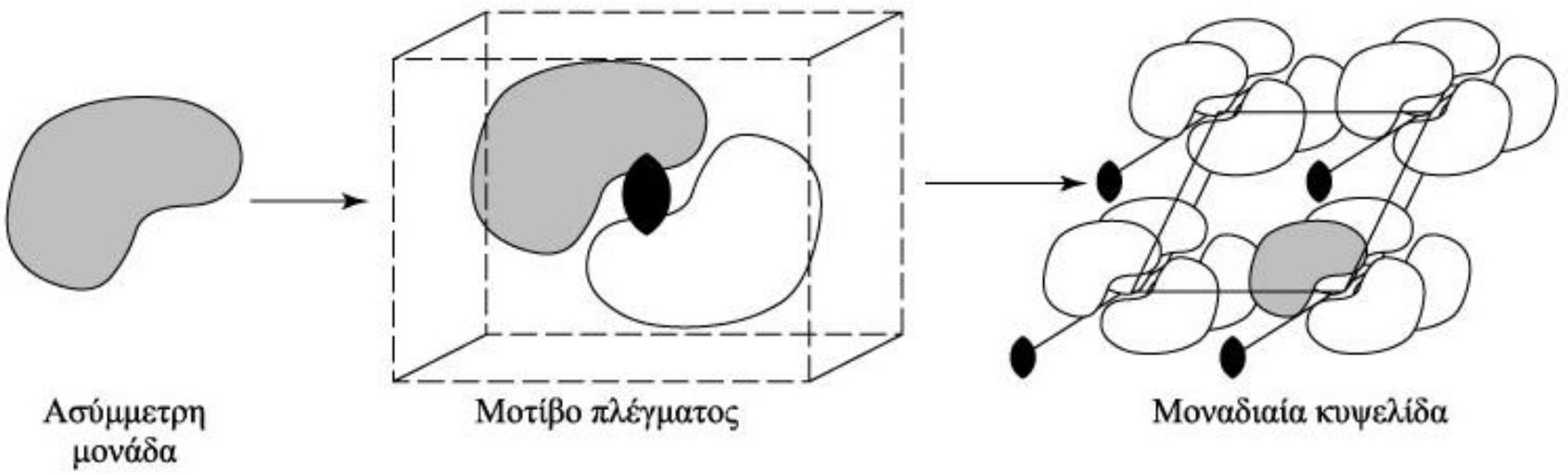


22/12/2015

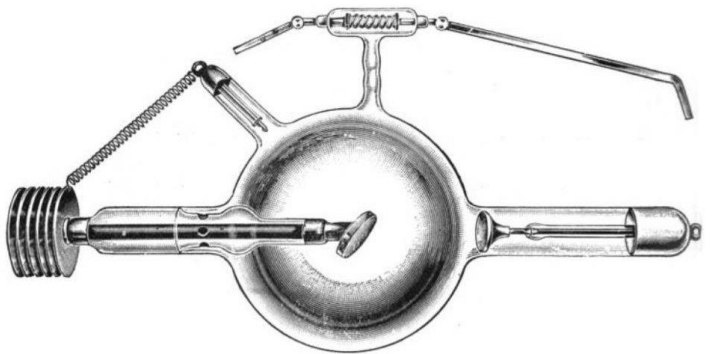


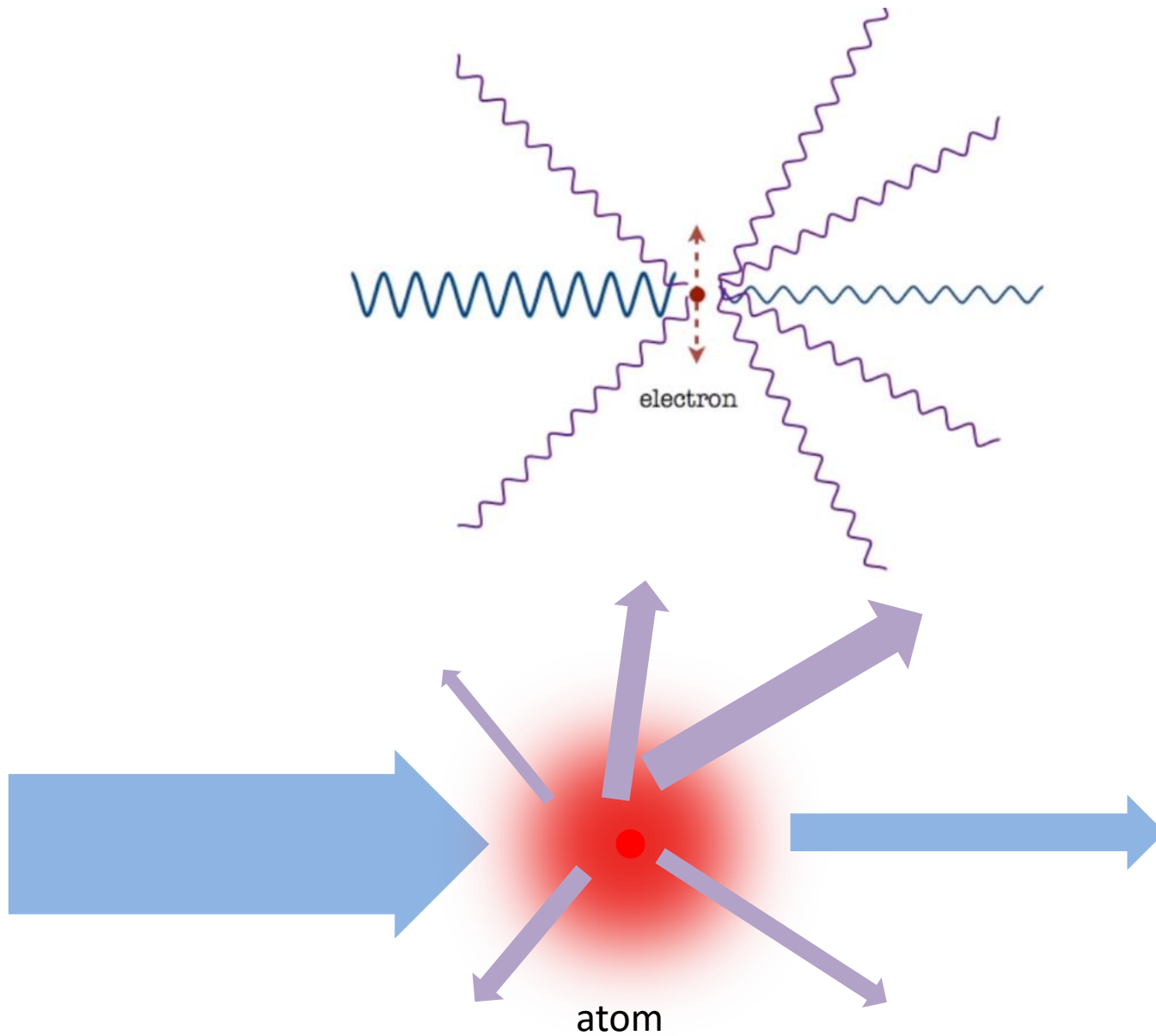
Δ.Δ. Λεωνίδας



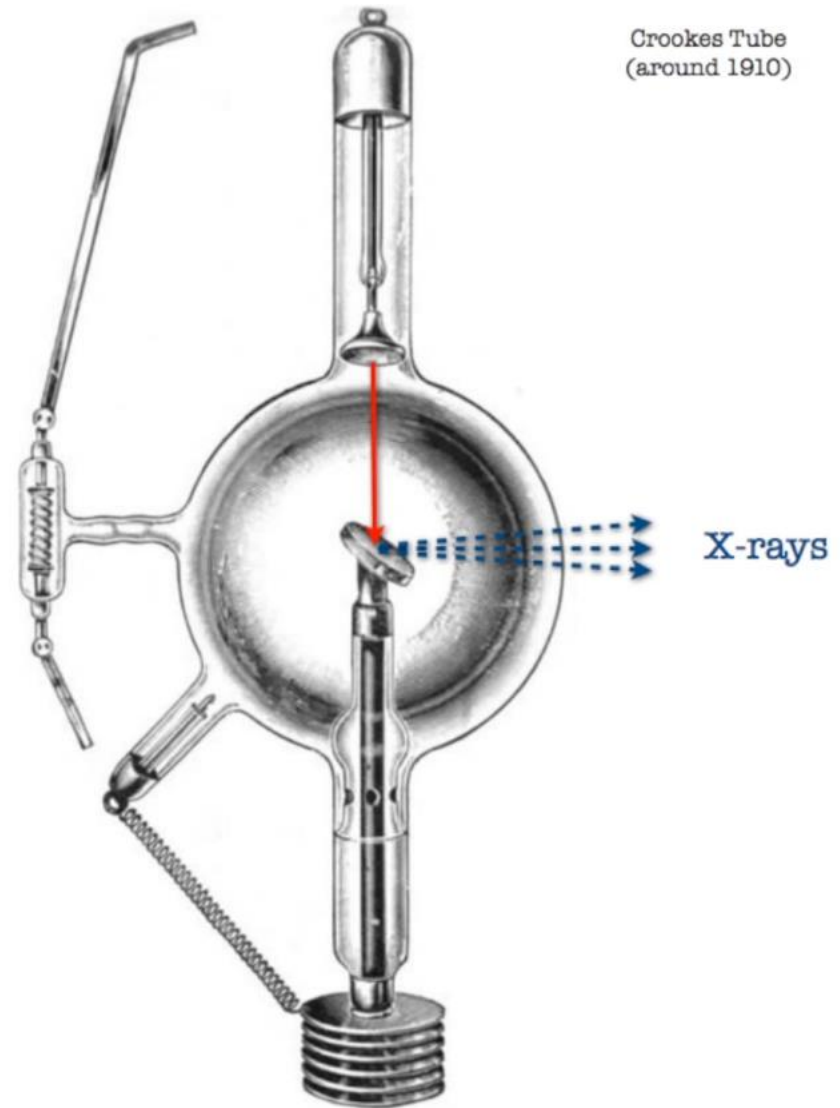


Το χέρι της Anna Bertha Röntgen





Röntgen και ακτίνες X



Κύματα ή σωματίδια ;

Το πείραμα των Laue, Friedrich & Knipping (1912)



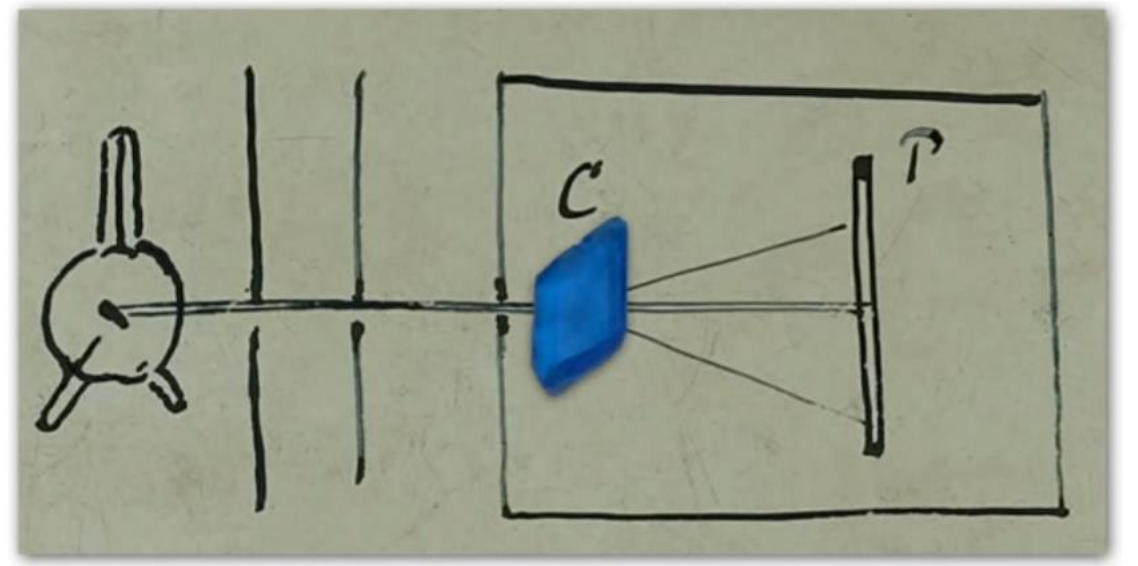
Max Von Laue



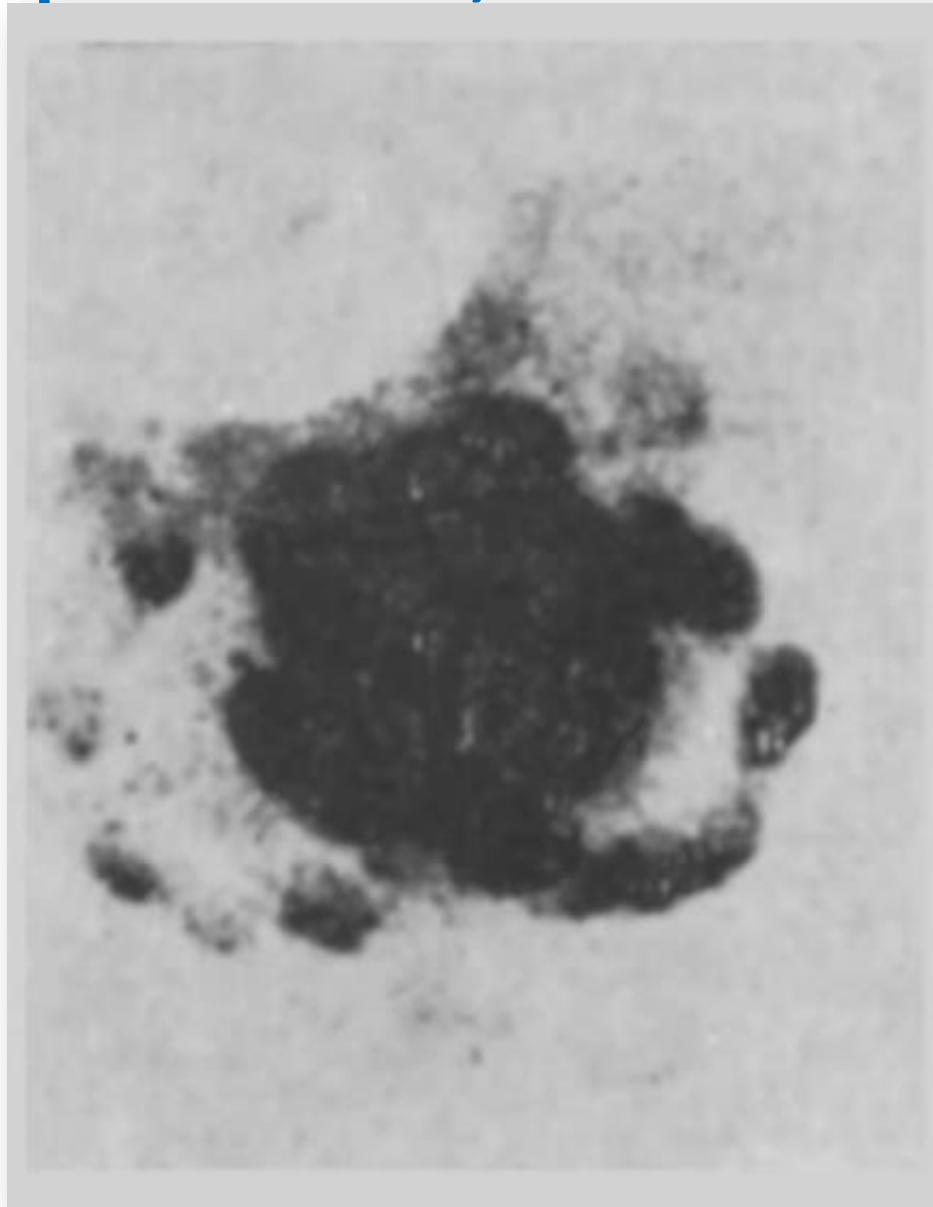
Walter Friedrich



Paul Knipping

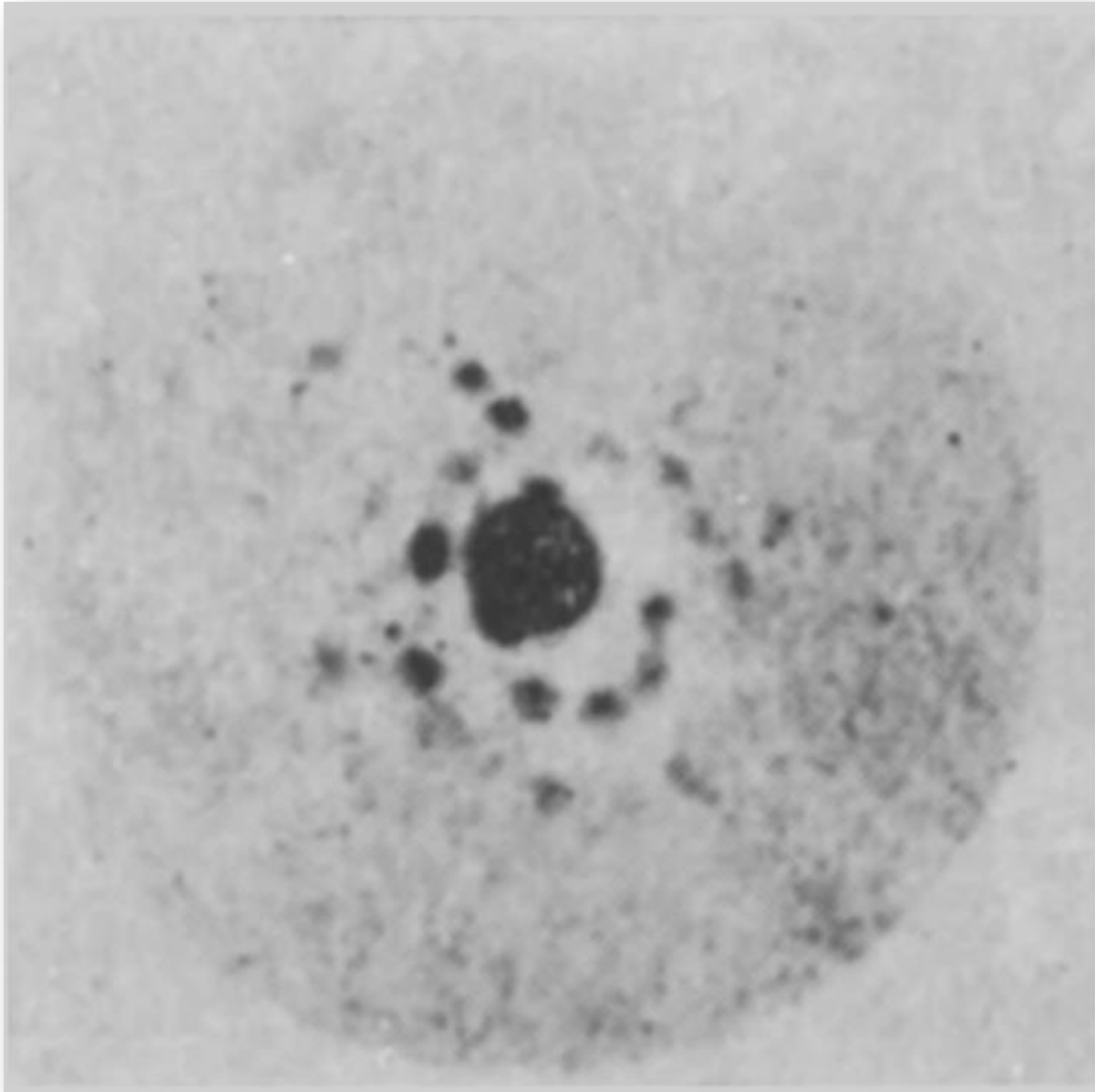


Το πείραμα των Laue, Friedrich & Knipping



The development of x-ray analysis. W.L. Bragg.

Το πείραμα των Laue, Friedrich & Knipping

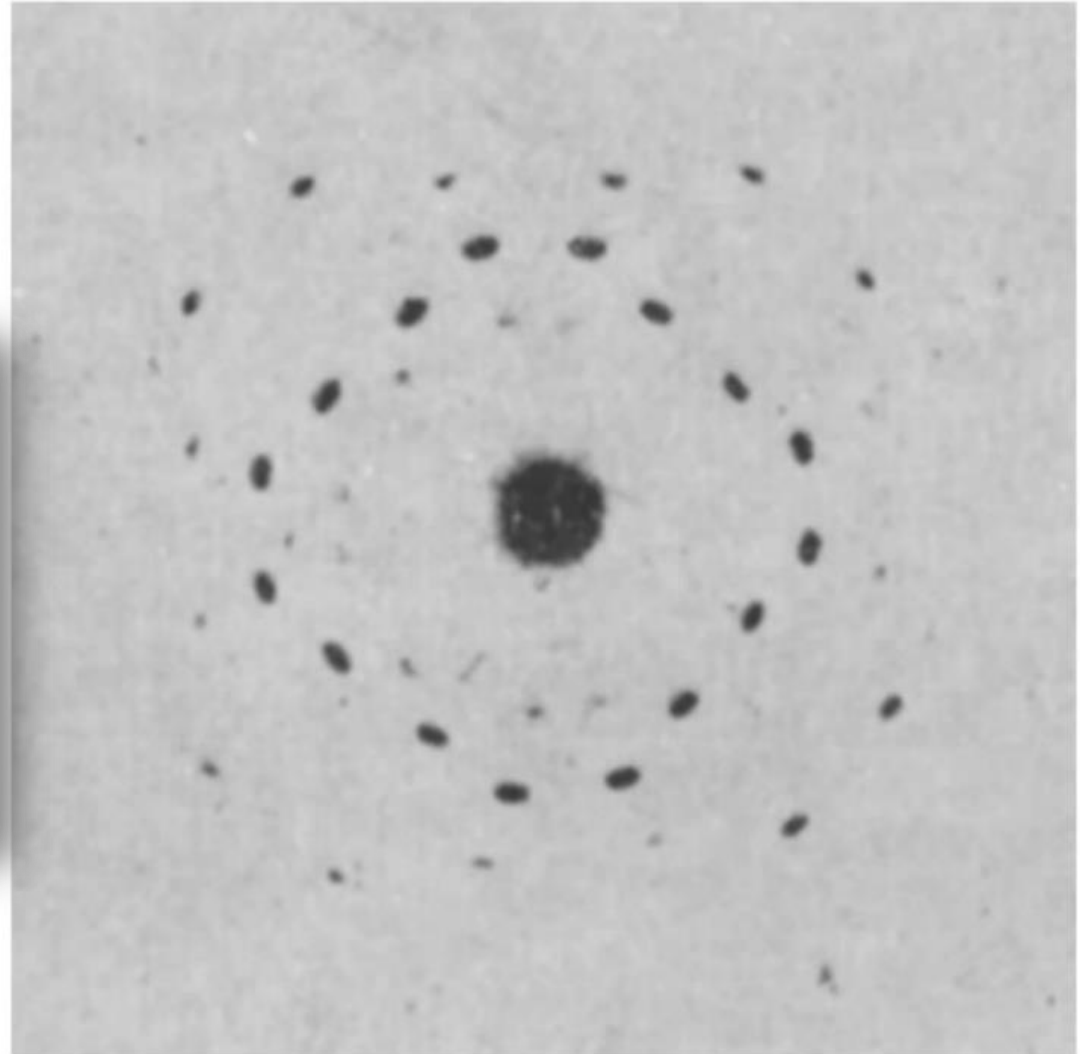
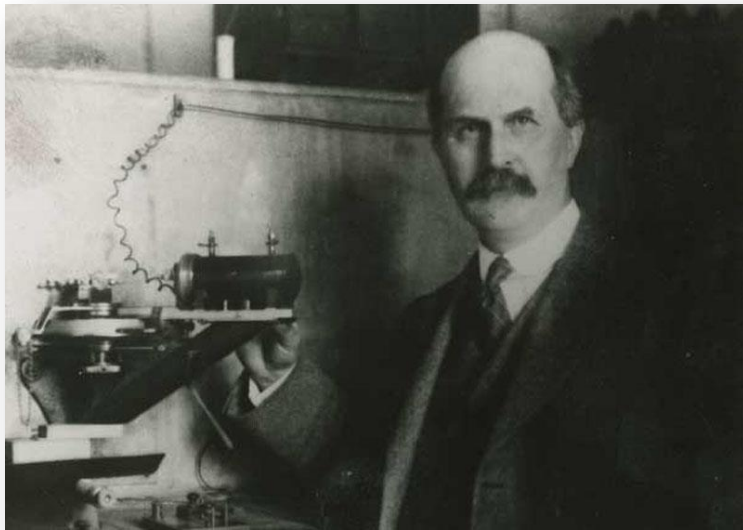


The development of x-ray analysis. W.L. Bragg.

Κρύσταλλοι ZnS



Περίθλαση από κρύσταλλο ZnS



(Friedrich and Knipping)

Εικόνα από Bragg. W.L. (1913) *Proc. Camb. Phil. Soc.* 17, 43-57

Ένα γράμμα από τον Lars Vegard (Ιούνιος 1912)

Recently, however, certain
new curious properties of
X-rays have been discovered
by Dr. Laue in Munich.

**«Πρόσφατα, νέες περίεργες ιδιότητες
των ακτίνων Χ έχουν ανακαλυφθεί
από τον Δρ Laue στο Μόναχο.»**

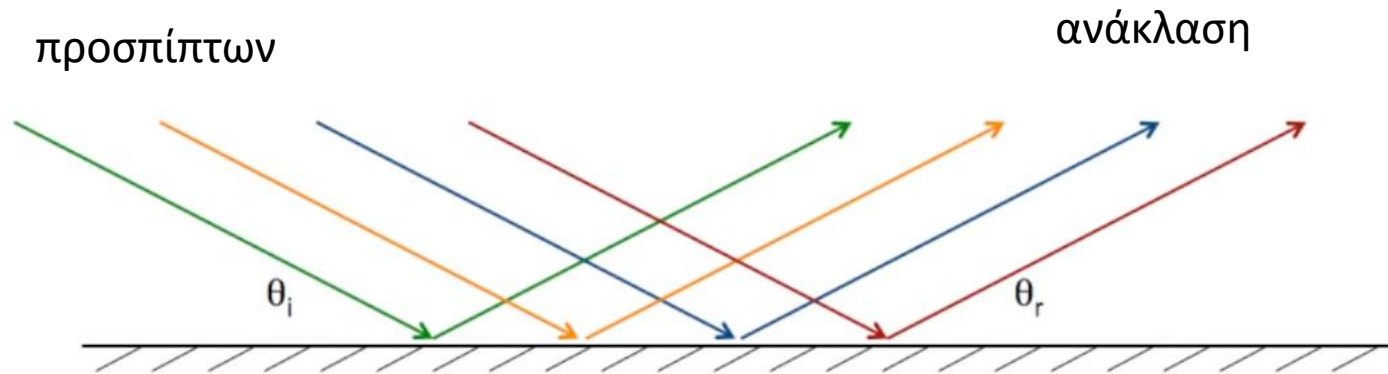


William H Bragg

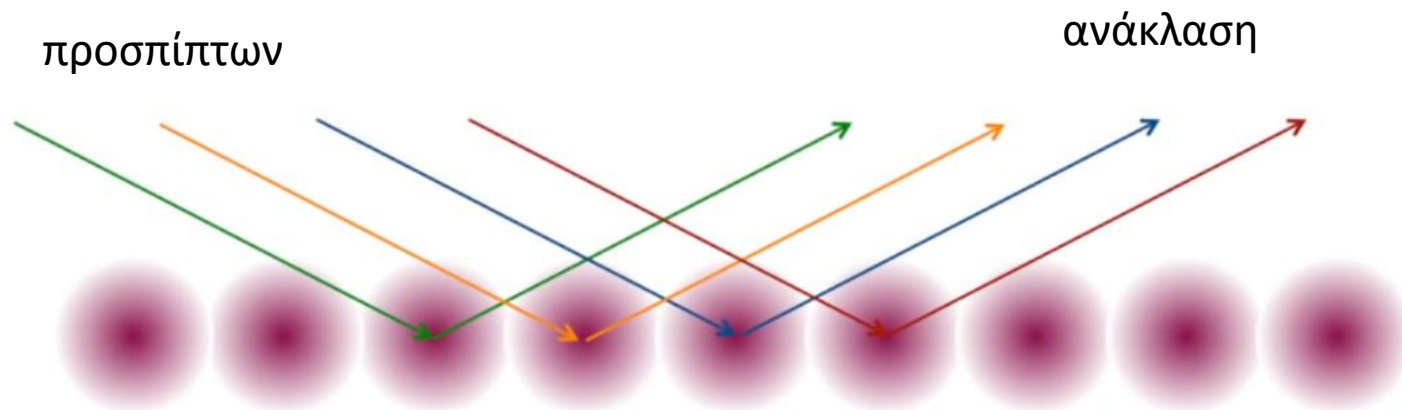


W Lawrence Bragg

Ανάκλαση από ένα κάτοπτρο



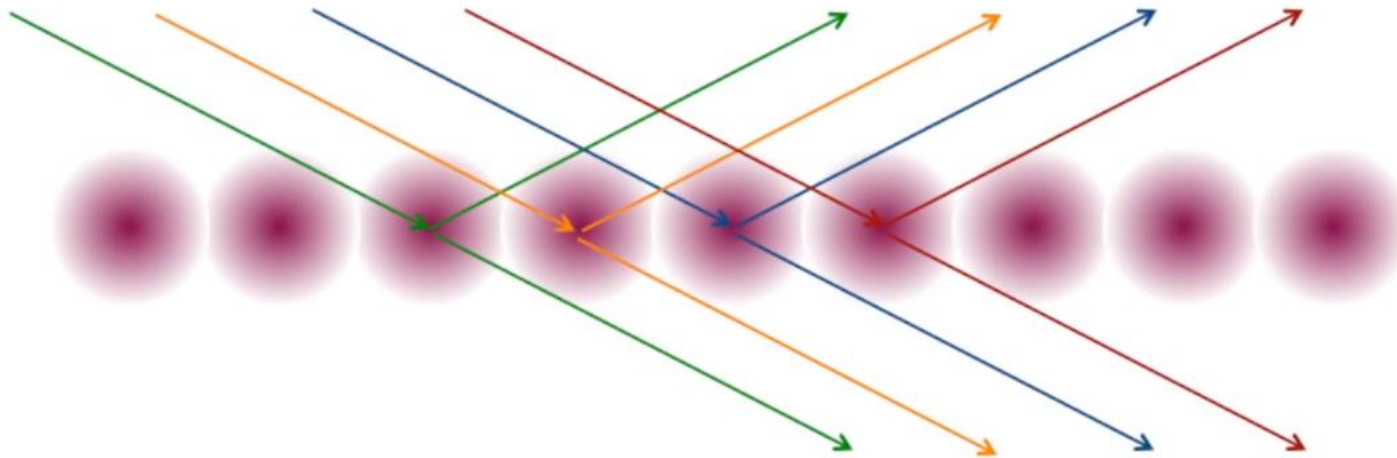
Ανάκλαση από ένα επίπεδο ατόμων



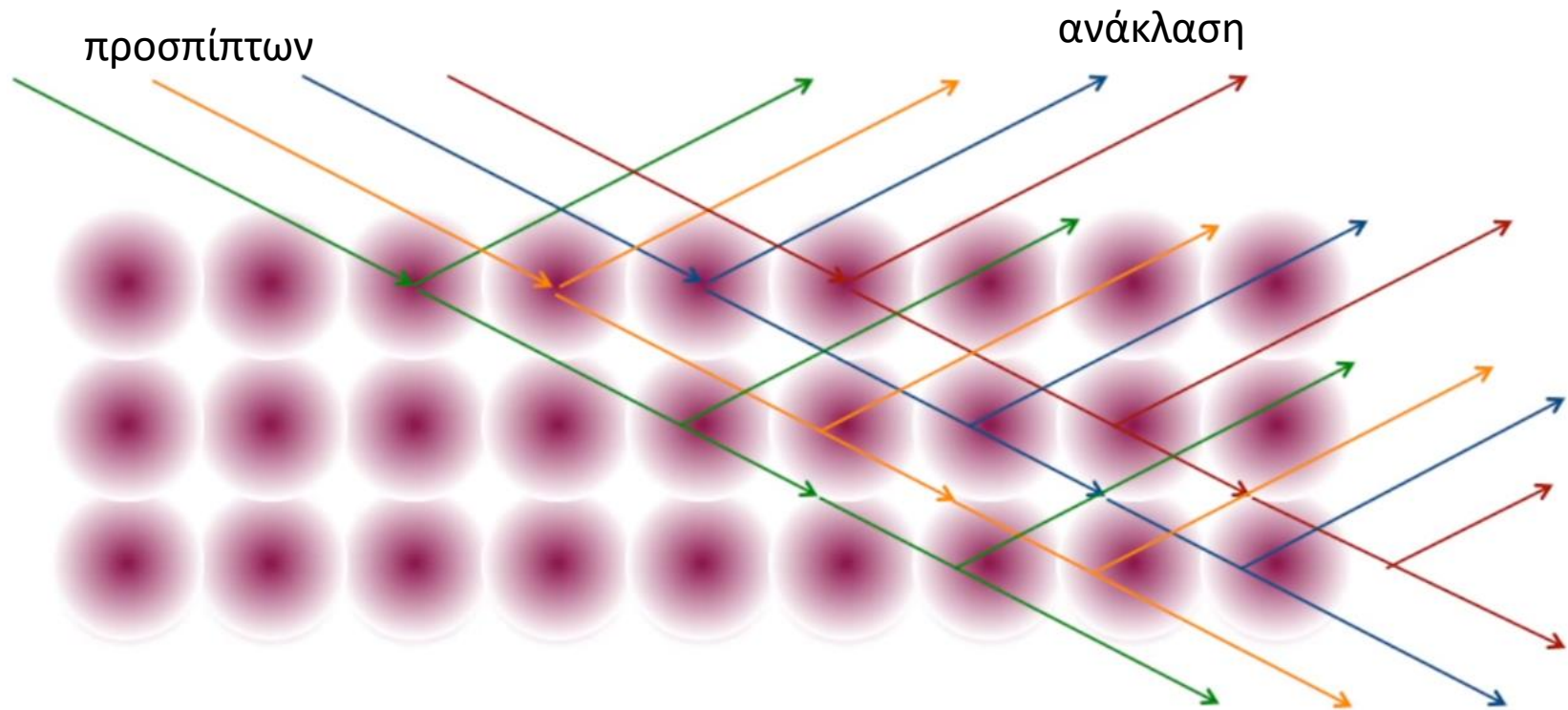
Ανάκλαση από ένα ημιπερατό επίπεδο ατόμων

προσπίπτων

ανάκλαση

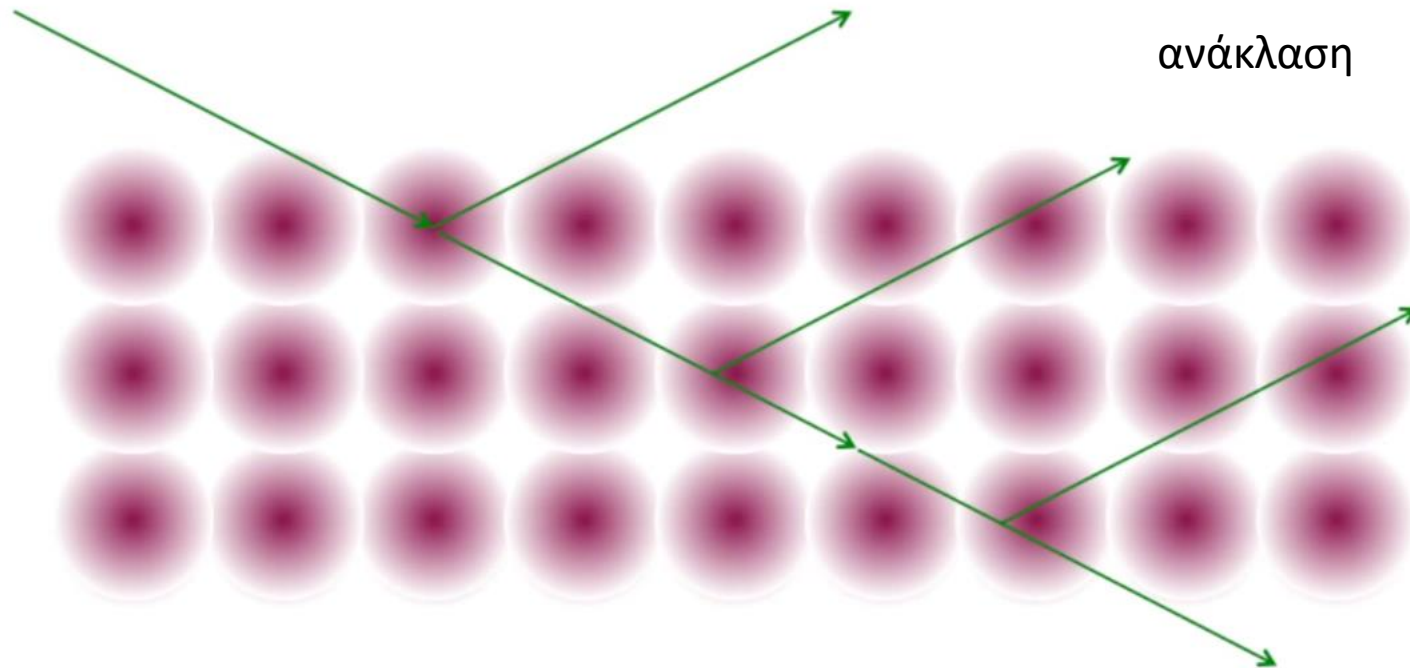


Ανάκλαση από ένα ημιπερατό στρώμα ατόμων

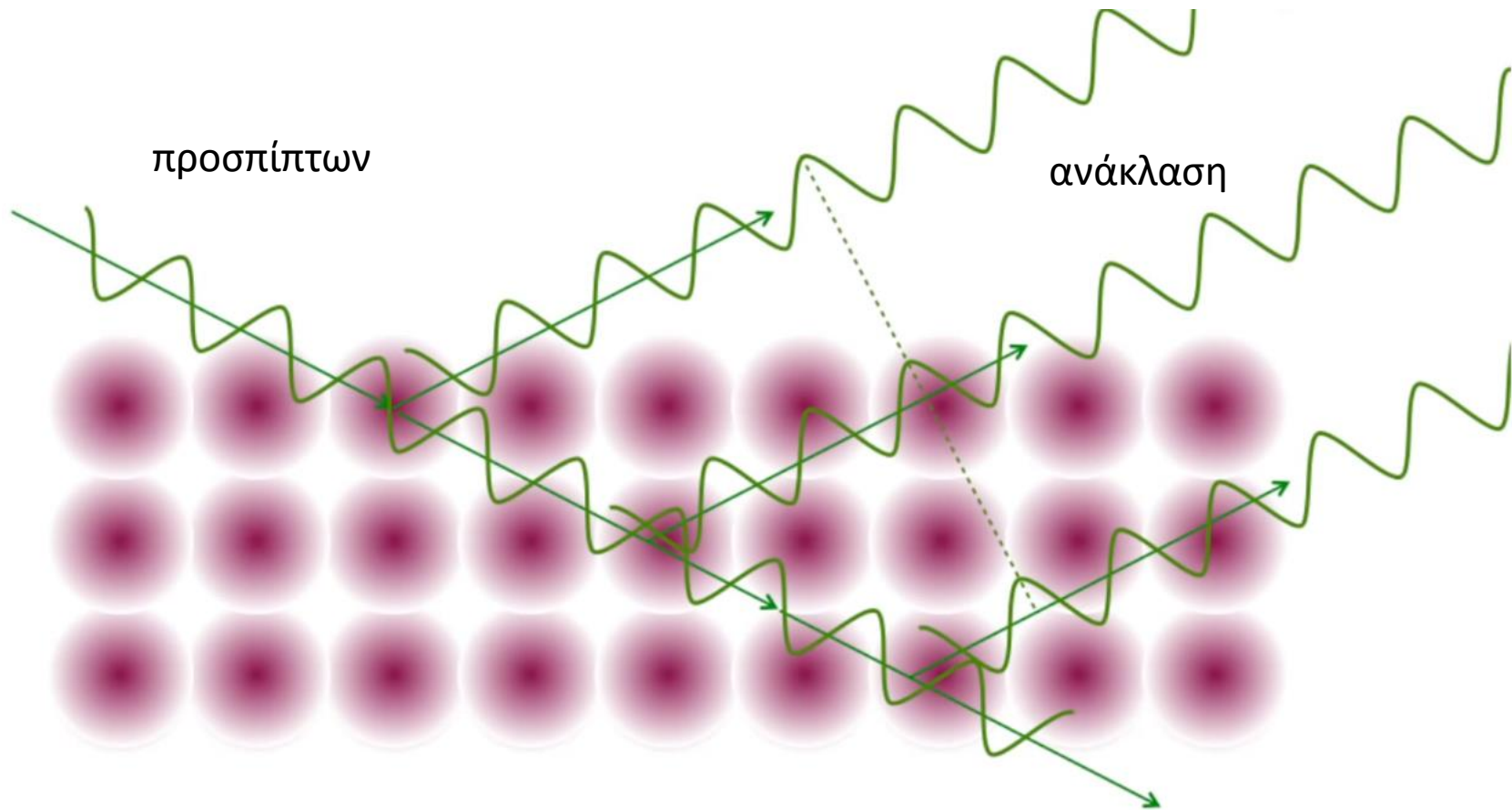


Ανάκλαση από ένα ημιπερατό στρώμα ατόμων

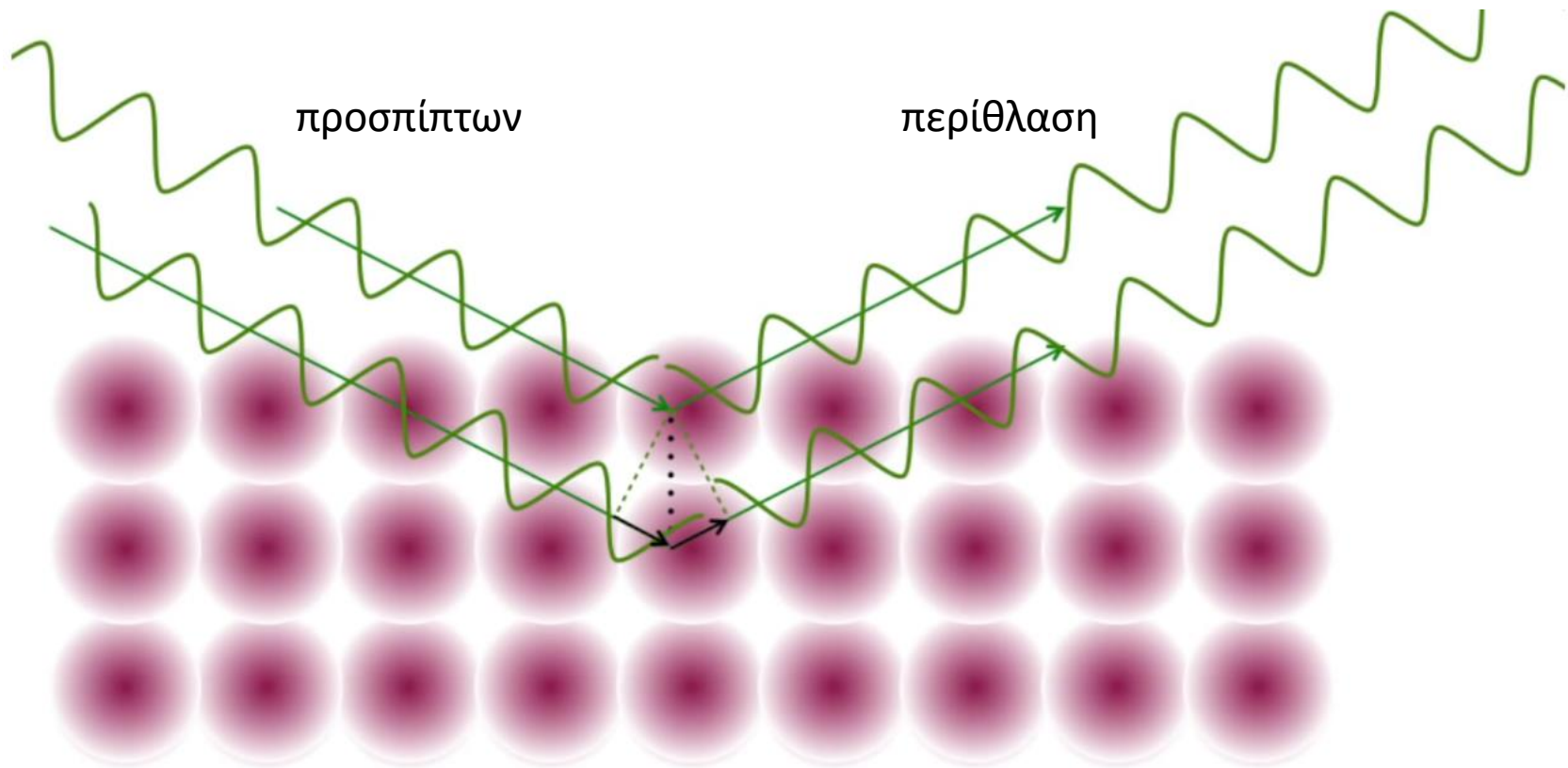
προσπίπτων



Ανάκλαση από ένα ημιπερατό στρώμα ατόμων

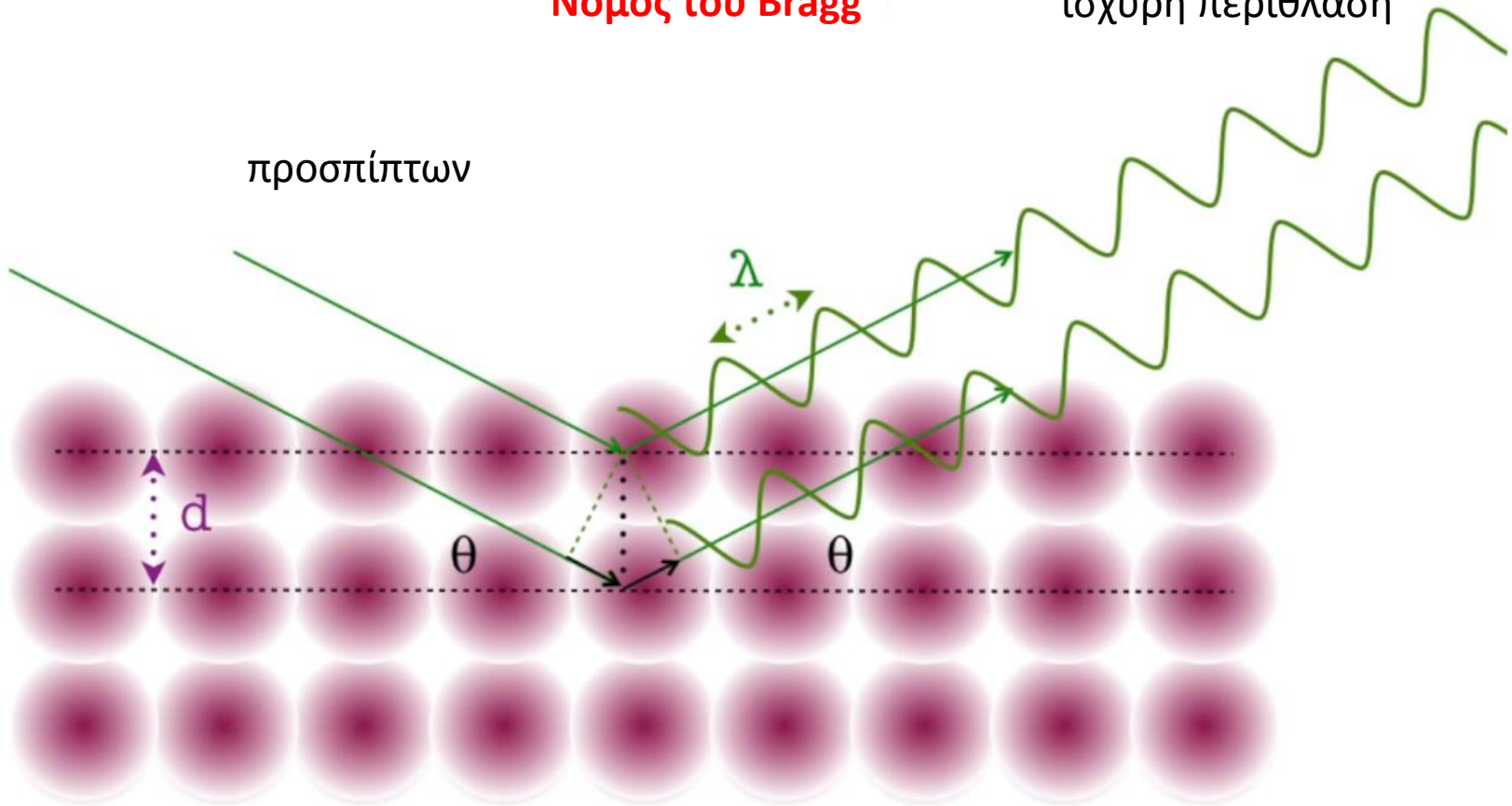


Ανάκλαση από ένα ημιπερατό στρώμα ατόμων



Νόμος του Bragg

ισχυρή περίθλαση

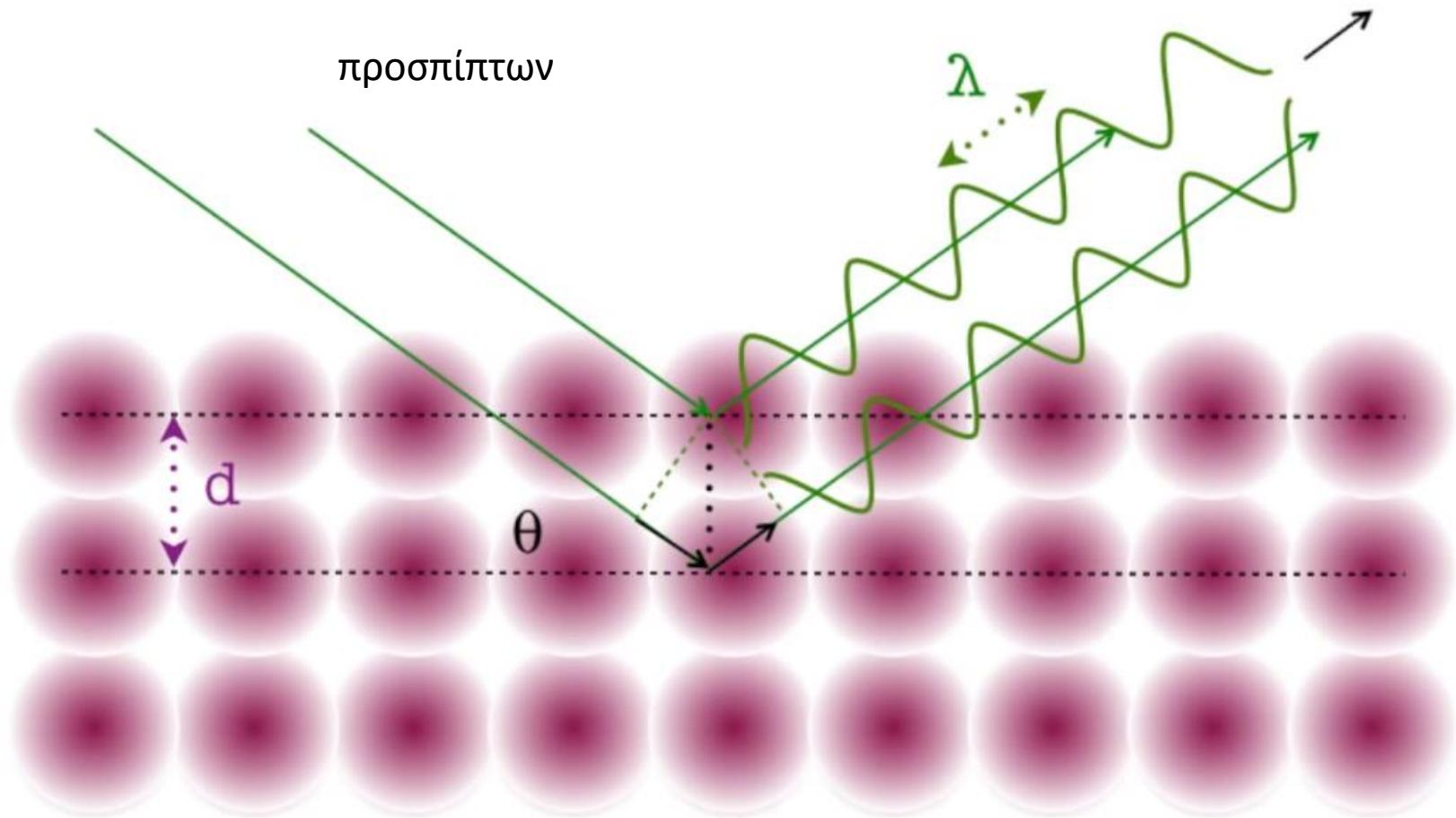


$$\text{Διαφορά βήματος} = 2d \sin \theta$$

$$\text{Ισχυρή περίθλαση αν } 2d \sin \theta = n\lambda$$

Νόμος του Bragg

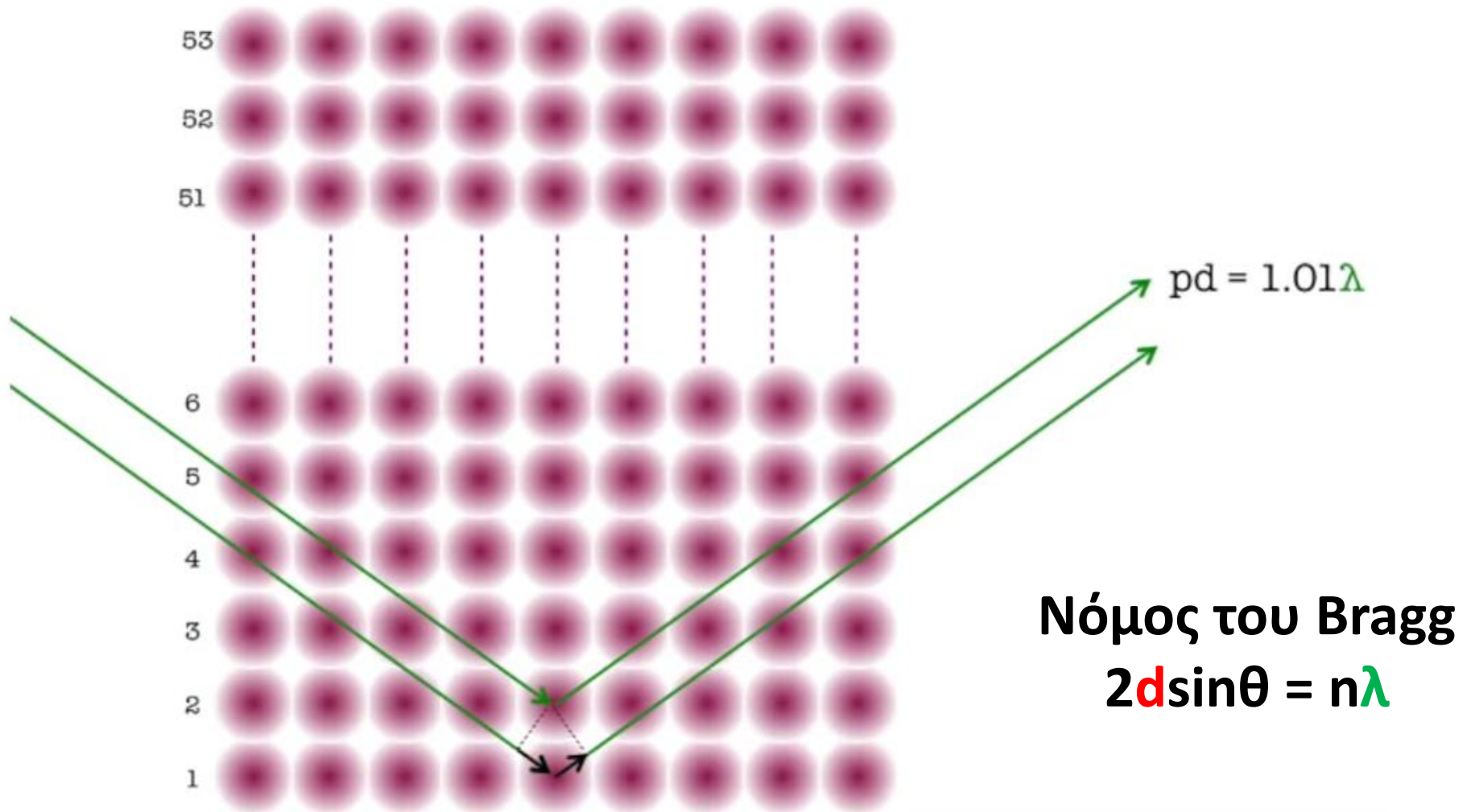
Δεν υπάρχει περίθλαση



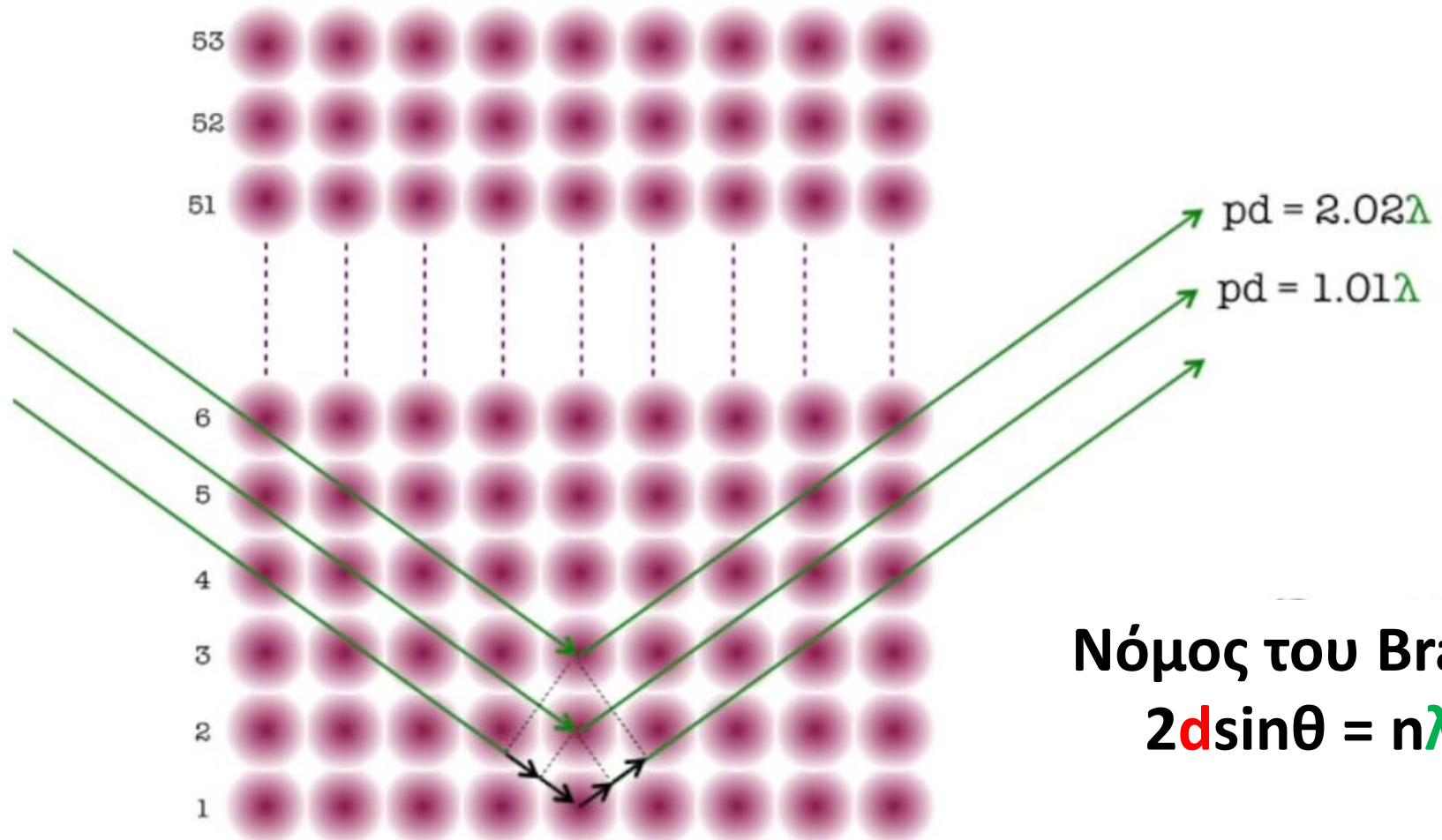
$$\text{Διαφορά βήματος} = 2d \sin \theta$$

$$\text{Στην περίπτωση αυτή } 2d \sin \theta = (2n-1)\lambda/2$$

Καταστροφική παρεμβολή

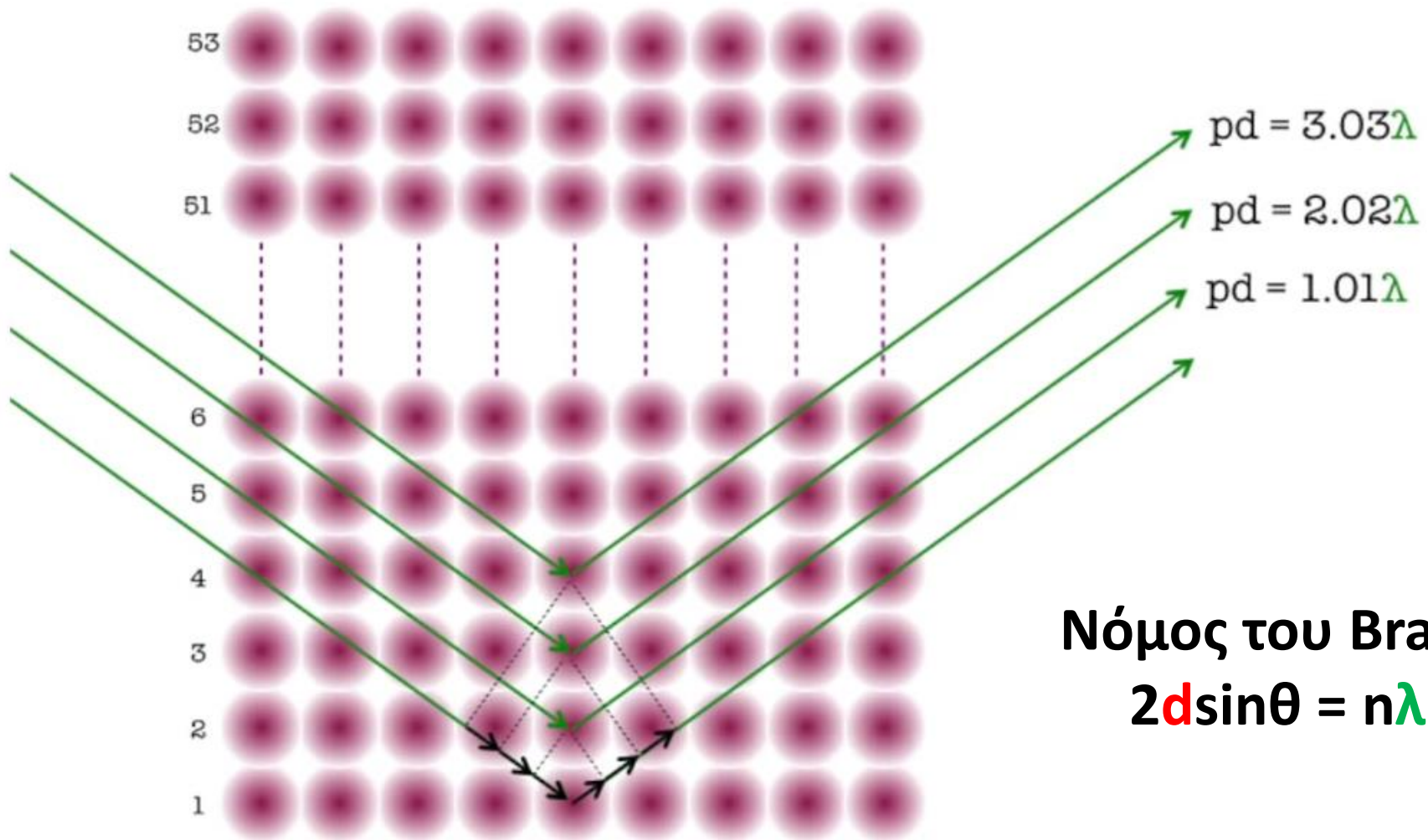


Καταστροφική παρεμβολή



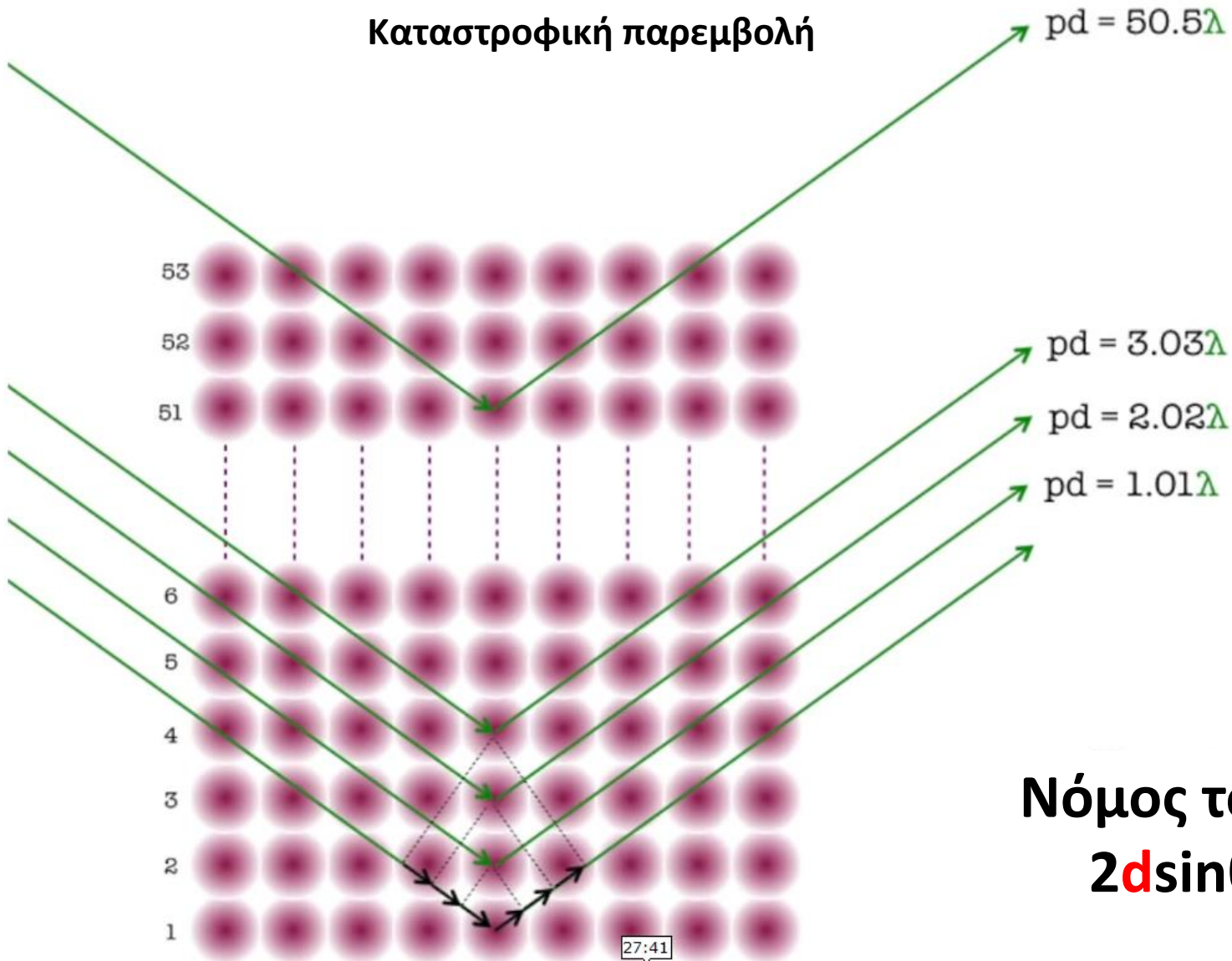
Νόμος του Bragg
 $2d \sin \theta = n\lambda$

Καταστροφική παρεμβολή



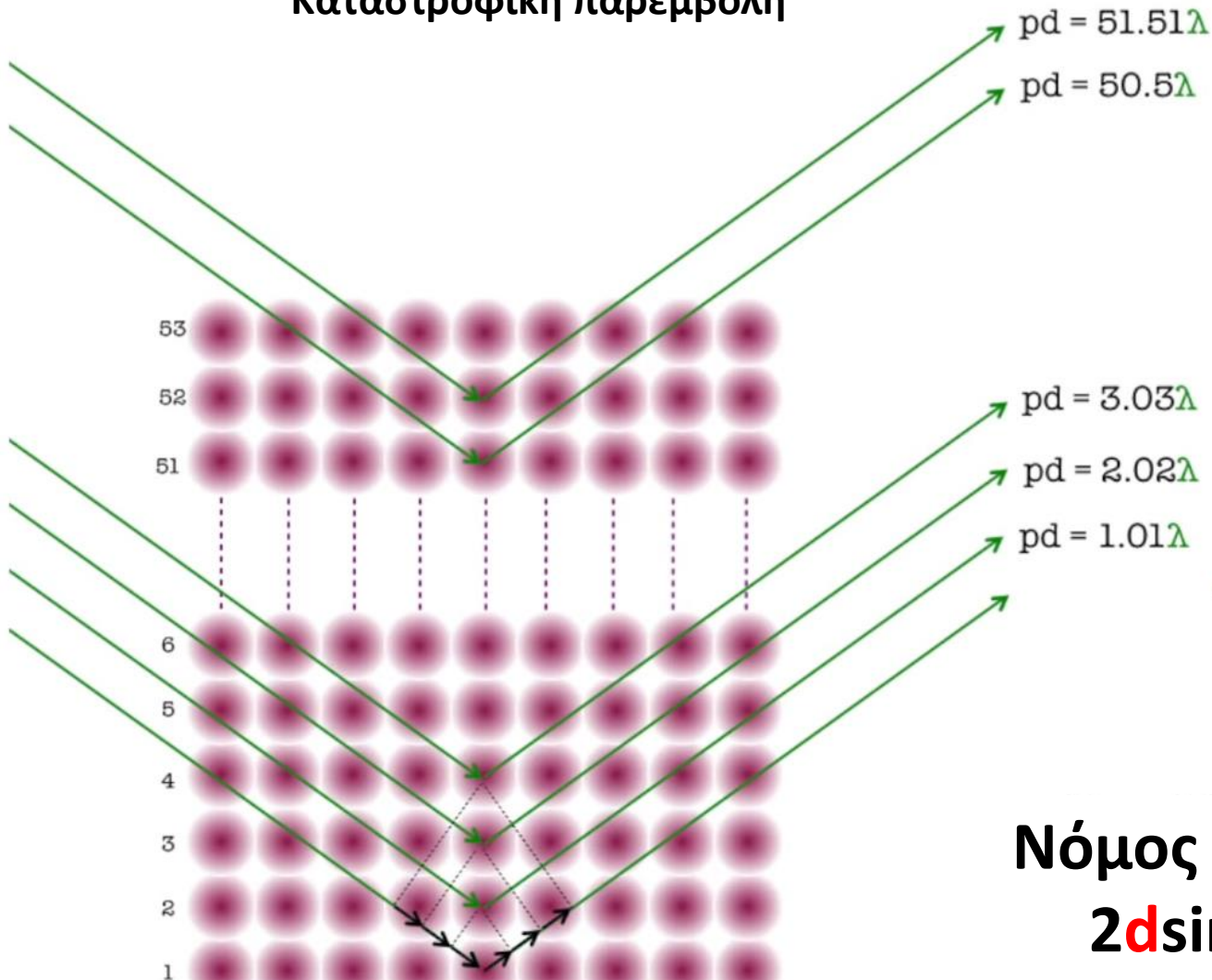
Νόμος του Bragg
 $2d \sin \theta = n\lambda$

Καταστροφική παρεμβολή



Νόμος του Bragg
 $2d\sin\theta = n\lambda$

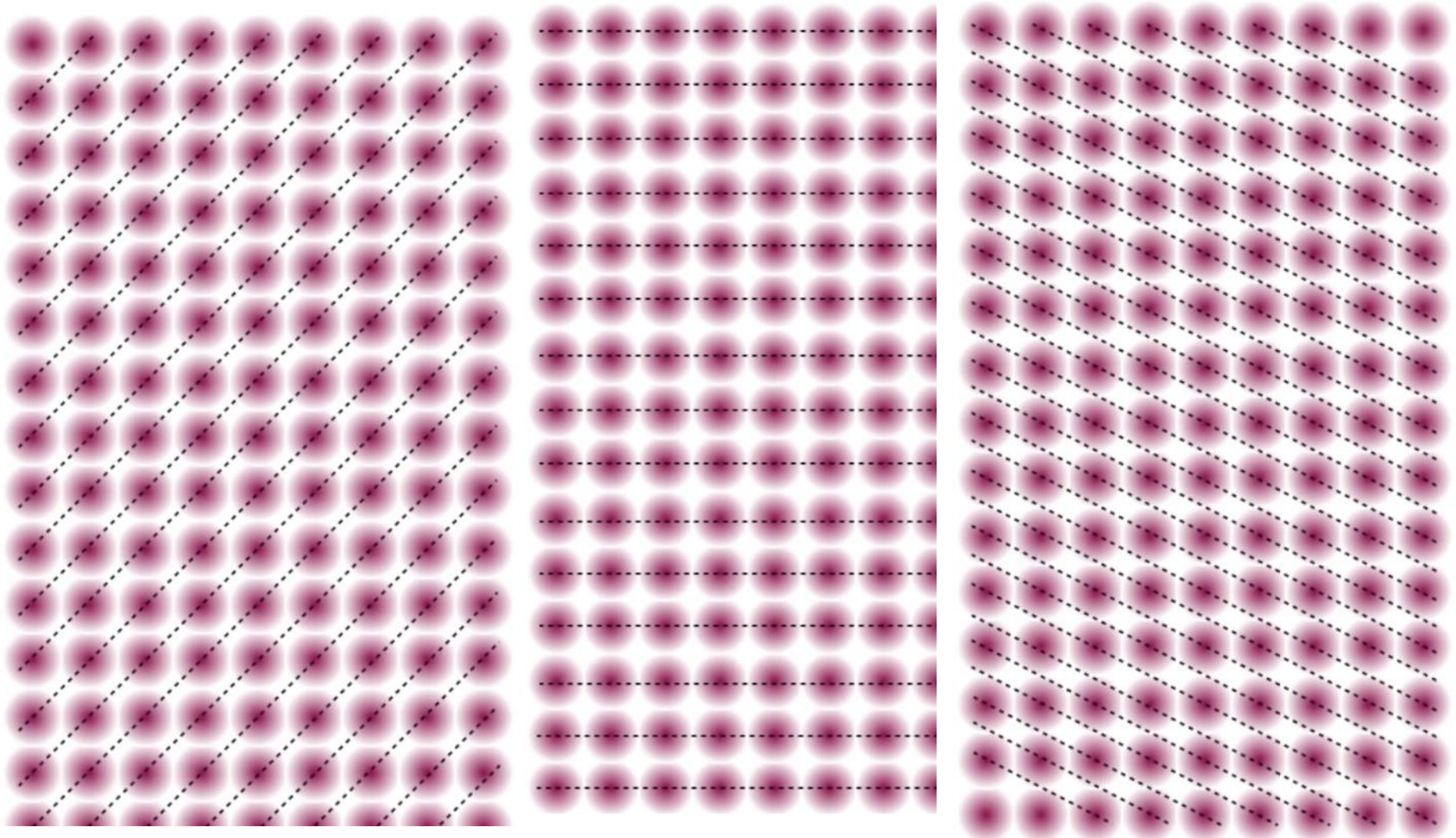
Καταστροφική παρεμβολή

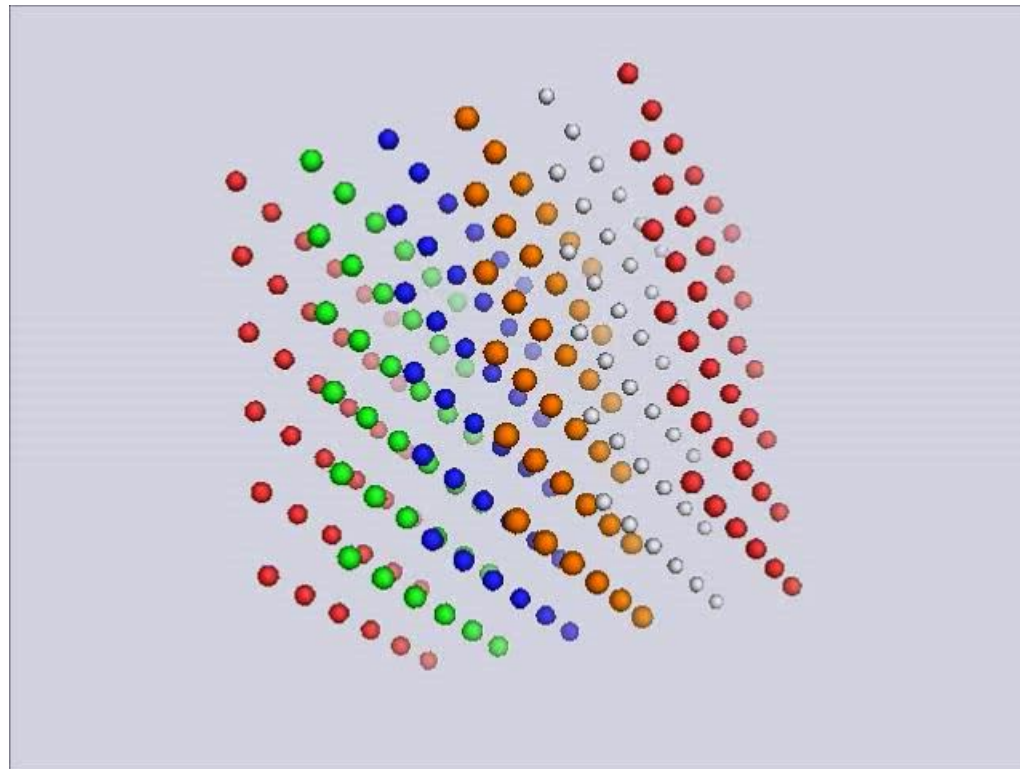


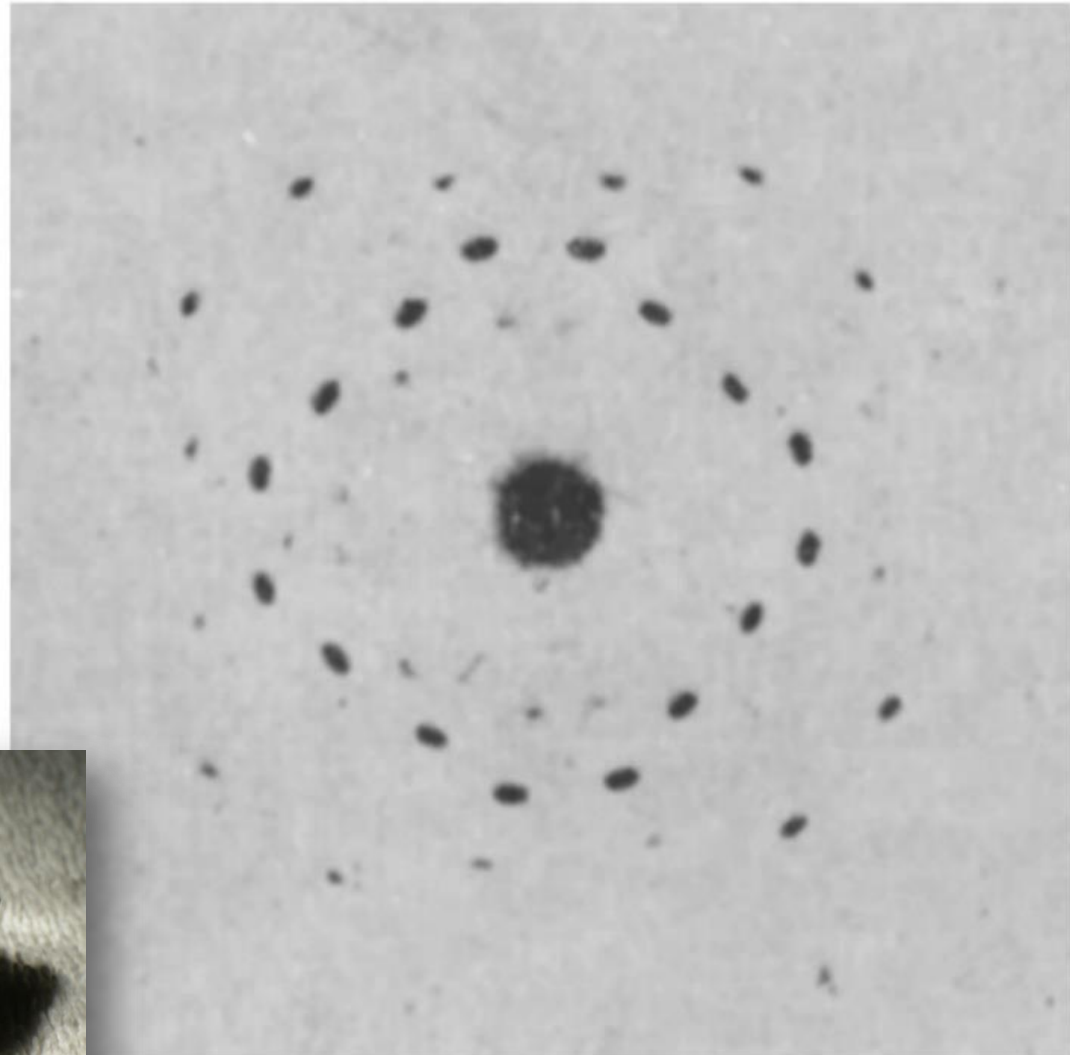
Νόμος του Bragg

$$2d \sin\theta = n\lambda$$

Στρώματα σε κρυστάλλους







(Friedrich and Knipping)

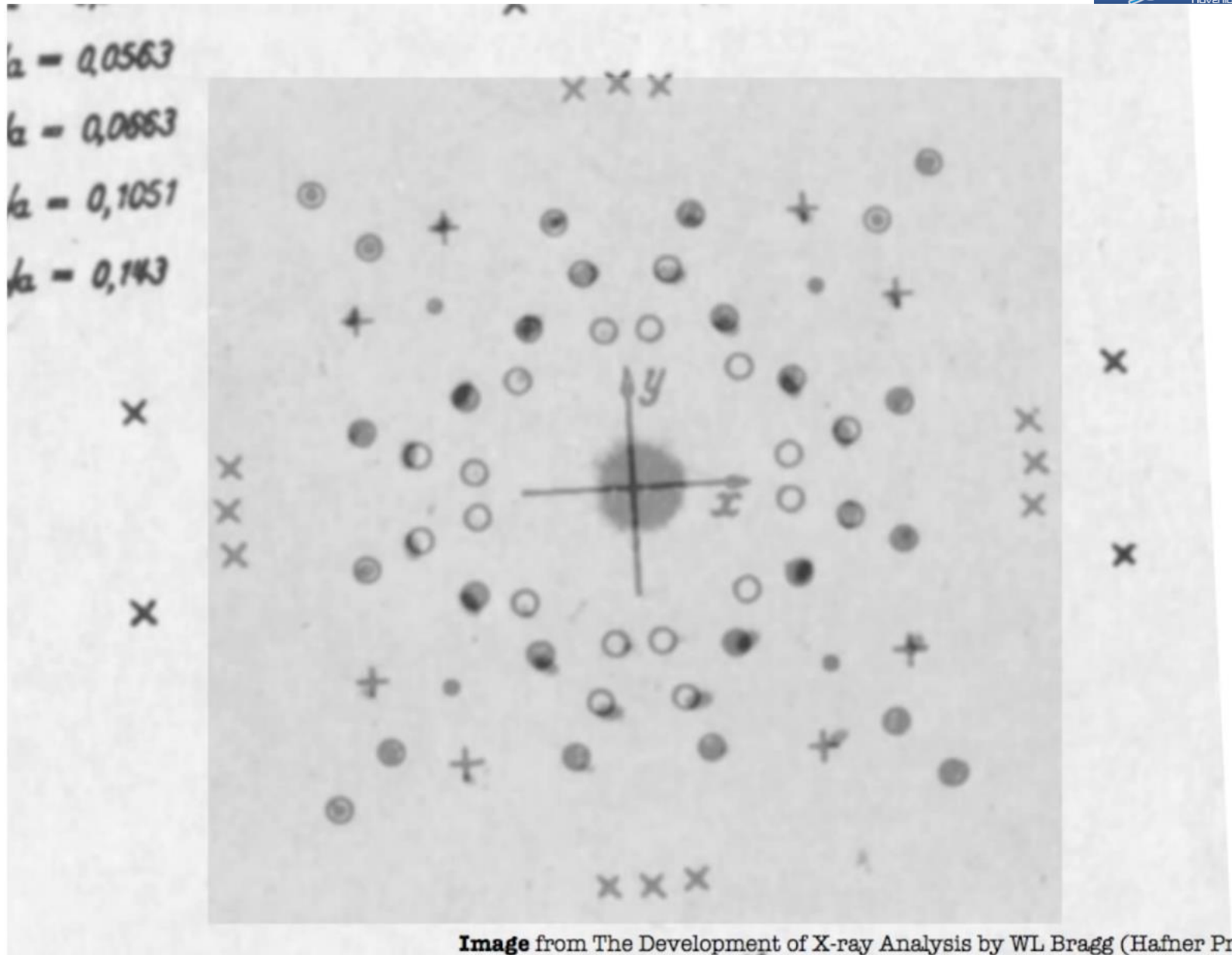


Image from The Development of X-ray Analysis by WL Bragg (Hafner Press)

Image: Bragg archive (RI) - WLB_86_3

No 2 was taken for 40 minutes. The pattern is not quite symmetrical as you can see, it is curious that it should be so nearly so.

$$\text{angle of incidence } 90^\circ - (17.5^\circ - 5.8^\circ) = \underline{\underline{77.3^\circ}}$$

Distance of plate from mica alt 4.2 cm.

The photos are very bad, I did them hurriedly last night.

I have written to Armstrong asking him to lunch & tea. I must write that article before he turns up, I have been giving up any time to the experiment lately.

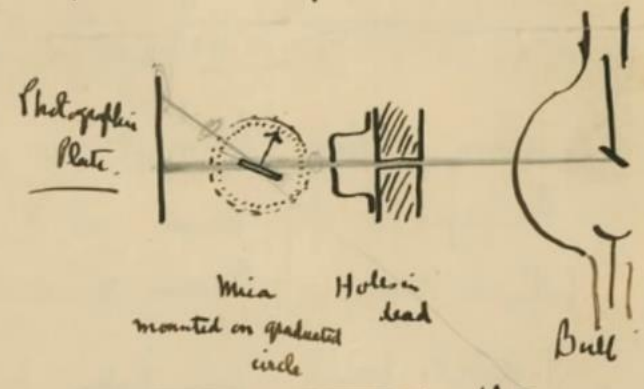
Ο Laue υπέθεσε πως κάθε ανάκλαση προέρχονταν από κάθε άτομο αλλά προφανώς δεν κατάλαβε!!!

Bragg's letter to his father (late 1912)



Dear Dad,

I enclose some very bad prints from the photos. They were taken like the



On each exposure being made, the plate was shifted on one, solid speak, and the angle of incidence altered, in Phot No 1.

Περιθλασίγραμμα του Bragg από ένα κρύσταλλο χλωριούχου καλίου (KCl)

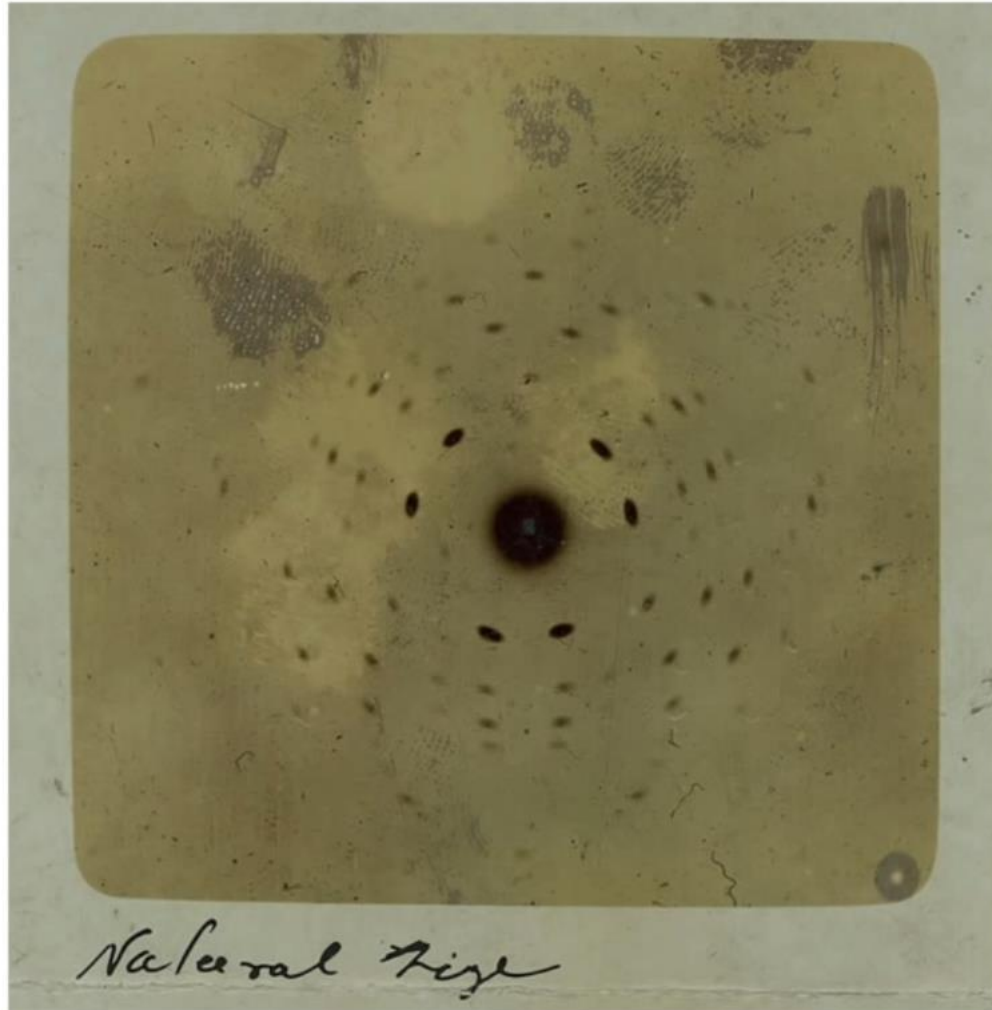


Image: Bragg Archive (RI) – WLB_86

KCl

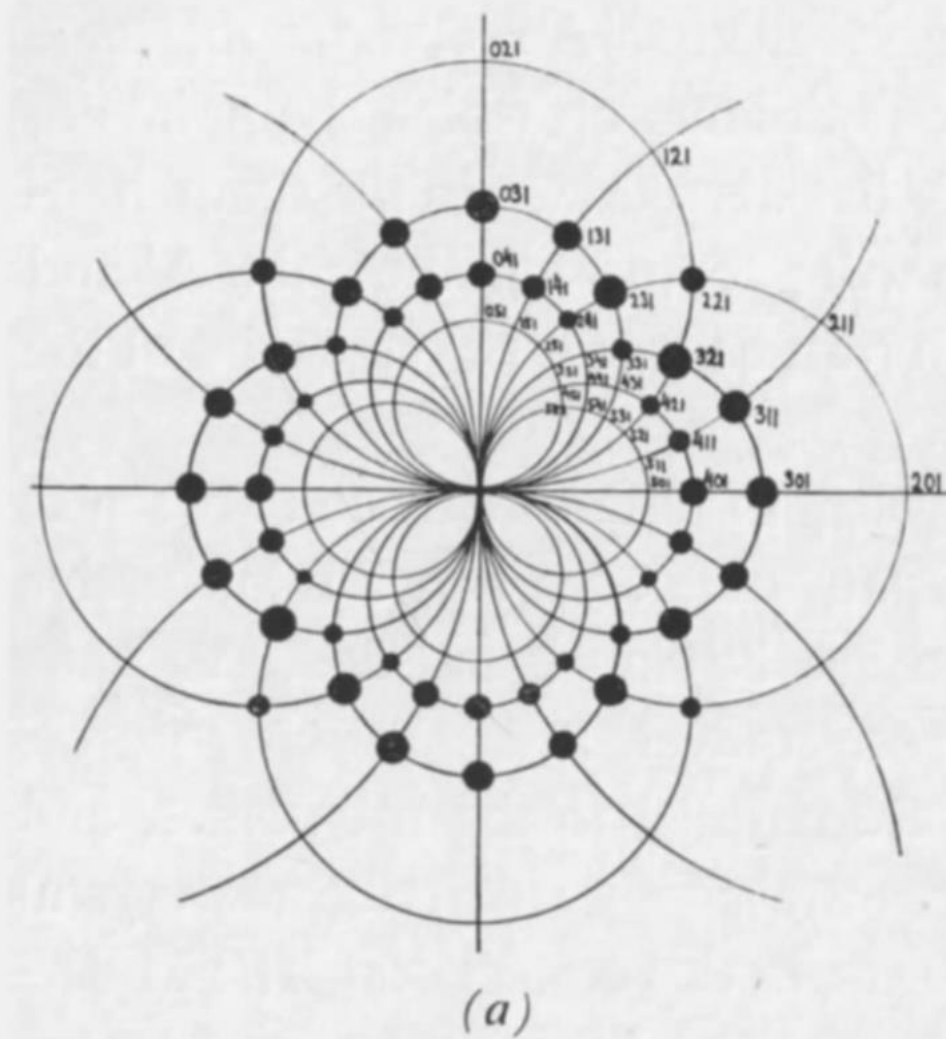


Image from The Development of X-ray Analysis by WL Bragg

NaCl

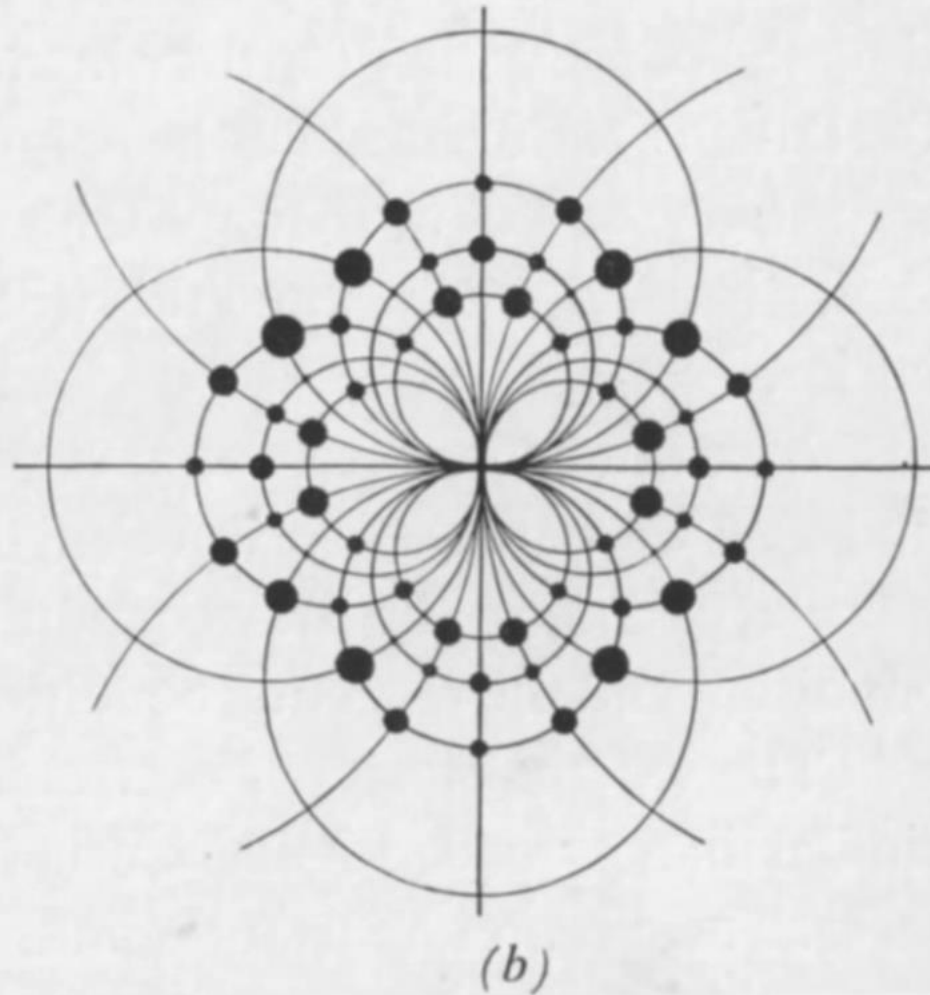


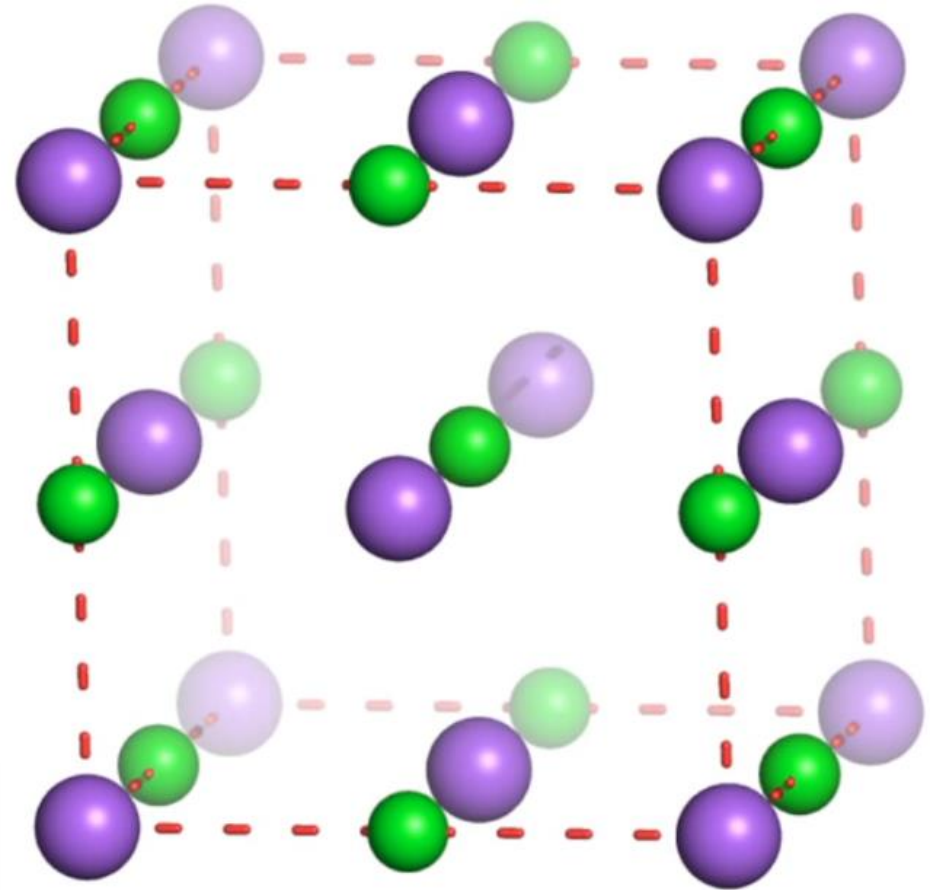
Image from The Development of X-ray Analysis by WL Bragg

Η δομή του NaCl

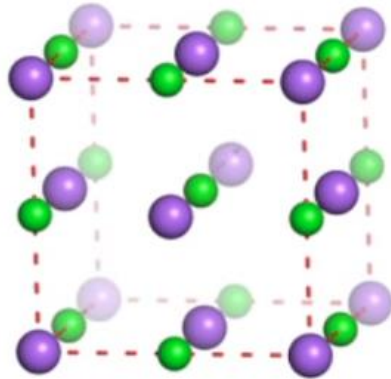
“It was on this rather indirect and slender evidence that I assigned the structure... in a paper read to the Royal Society in June 1913; fortunately further investigation established its correctness!”

WL Bragg

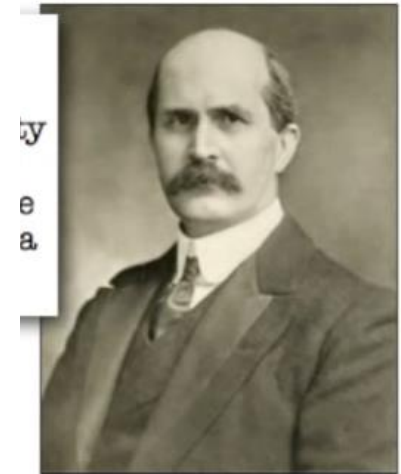
The Development of X-ray Analysis (1975)



Η αντίδραση των χημικών



Στο χλωριούχο νάτριο φαίνεται πως δεν υπάρχουν μόρια που αντιπροσωπεύουν το NaCl. Υπάρχουν ίσοι αριθμοί ατόμων νατρίου και χλωρίου σε ένα μοτίβο παρόμοιο με μία σκακιέρα, το οποίο είναι αποτέλεσμα γεωμετρίας και όχι σύζευξης ατόμων.



William H Bragg



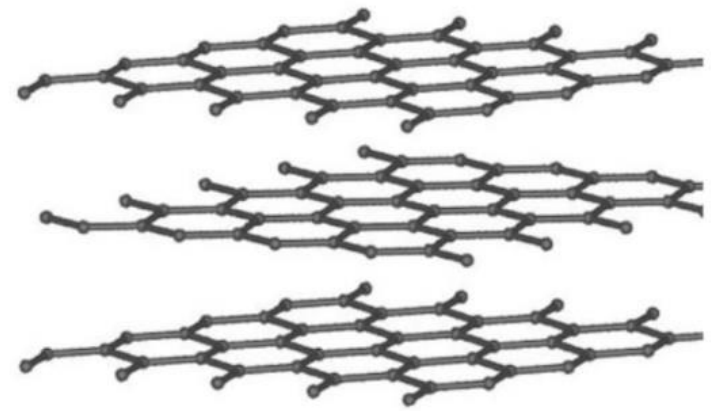
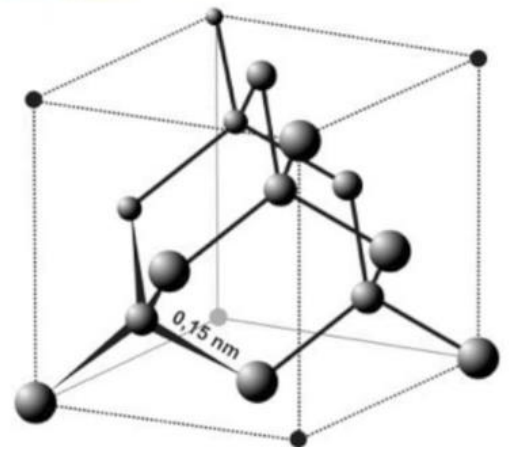
Henry Armstrong

Αυτή η δήλωση είναι παράλογη στο νιοστο βαθμό. Η Χημεία δεν είναι σκάκι ούτε γεωμετρία, ότι και να υποστηρίζει η φυσική των ακτίνων Χ...

Είναι ώρα οι χημικοί να αναλάβουν τη Χημεία και πάλι και να την προστατέψουν από τους νεόκοπους λάτρεις κίβδηλων θεών..

The Structure of the Diamond.
By W. H. BRAGG, M.A., F.R.S., Cavendish Professor of Physics in the University of Leeds, and W. L. BRAGG, B.A., Trinity College, Cambridge.
(Received July 30, 1913.)

The Structure of Graphite.
By J. D. BERNAL, B.A.
(Communicated by Sir William Bragg, F.R.S.—Received July 28, 1924.)



- **Iron pyrite** (Iron sulphide, FeS_2)
- **Calcite** (Calcium carbonate, CaCO_3)
- **Quartz** (Silicon dioxide, SiO_2)



Iron pyrite



Calcite



Quartz

είμαστε σχεδόν ένοχοι υπερβολής αν πούμε ότι το πείραμα Laue έχει οδηγήσει στην ανάπτυξη μιας νέας επιστήμης.

WH Bragg, Friday Evening Discourse (June 1914)

Ας σκεφτούμε πιο πολύπλοκους κρυστάλλους

IX. BAKERIAN LECTURE.—*X-rays and Crystal Structure.*

By W. H. BRAGG, D.Sc., F.R.S., Cavendish Professor of Physics in the University of Leeds.

Lecture delivered March 18,—MS. received April 7, 1915.

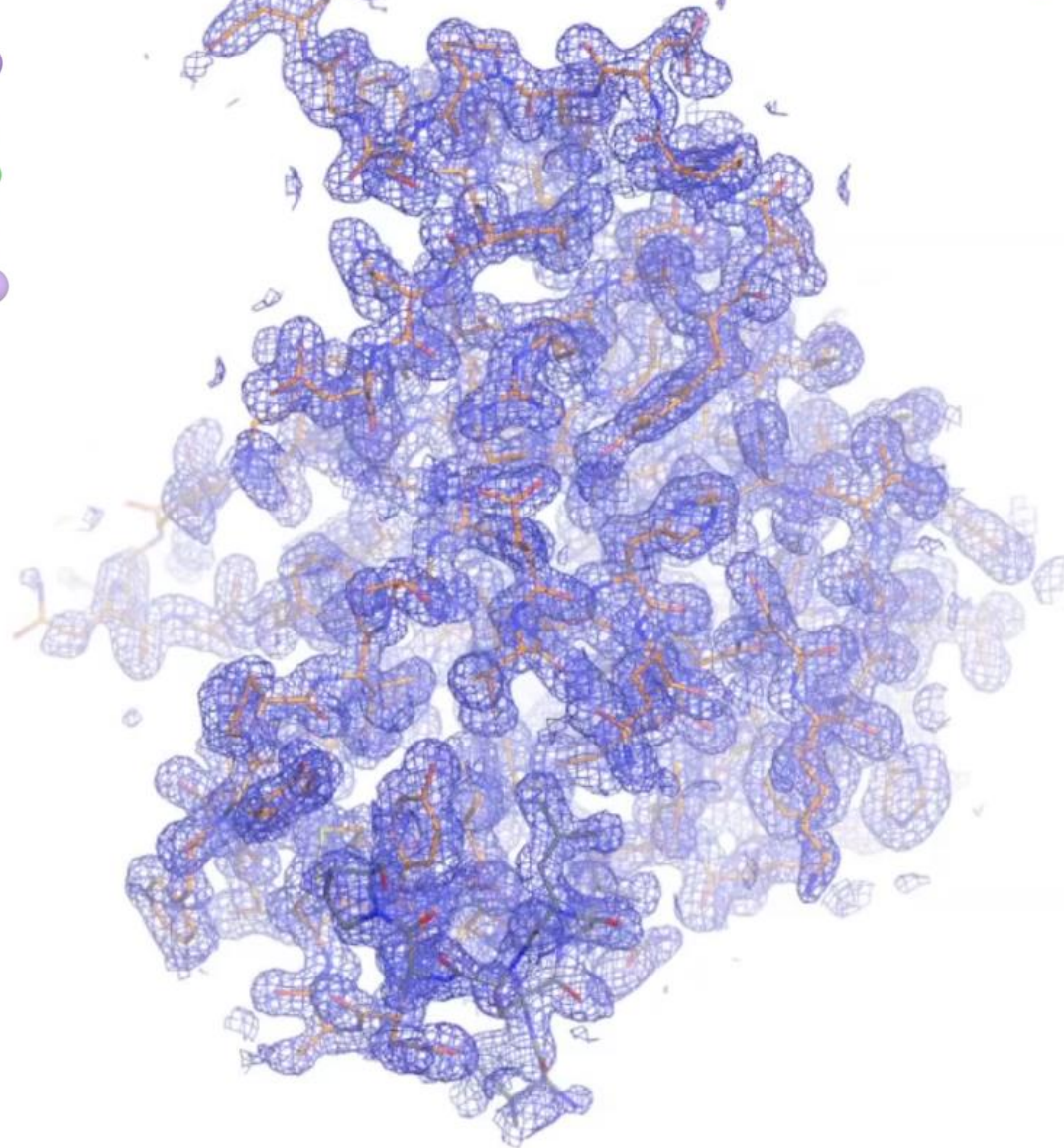
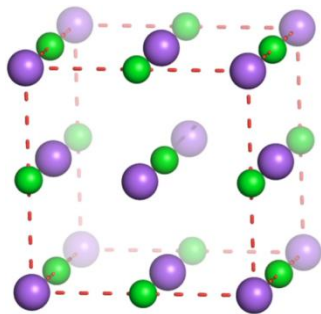
In the simple cases which we have been considering, the considerations of crystal symmetry, though unable of themselves to determine crystal structure, come so near to doing so that a few plain hints given by the new methods have been sufficient for the completion of the task. The exact positions of the atoms are then known.

But this is not the case with more complicated crystals.

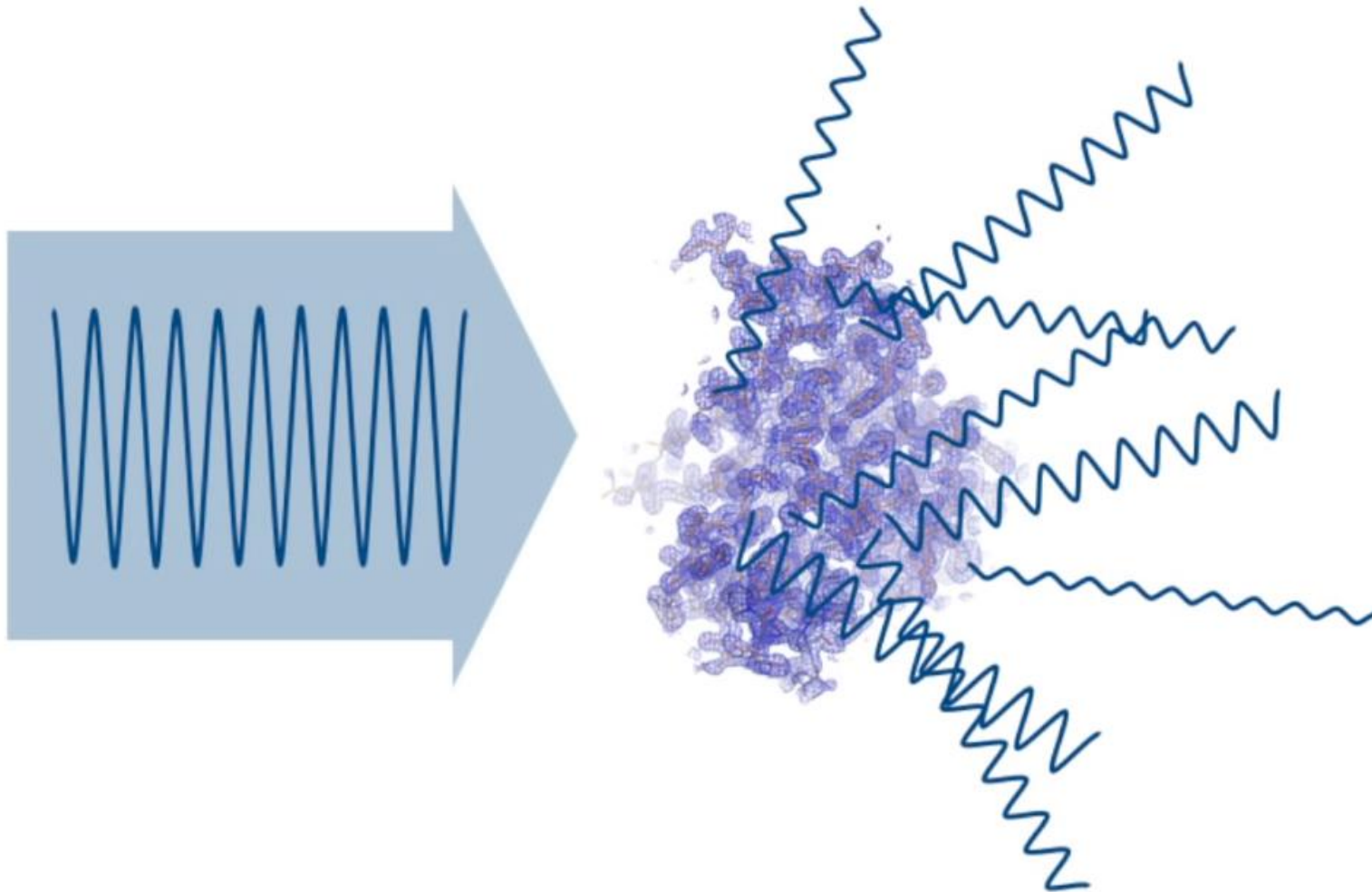
Στις απλές περιπτώσεις που έχουμε δουλέψει, οι εκτιμήσεις για τη συμμετρία των κρυστάλλων, αν και δεν μπορούν από μόνες τους να καθορίσουν την κρυσταλλική δομή, είναι τόσο επαρκή ώστε με μικρή βοήθεια από τις νέες μεθόδους να είναι δυνατή η ολοκλήρωση του έργου και να προσδιορίζονται οι επακριβείς θέσεις των ατόμων να γνωστή τότε.

Εντούτοις με πιο πολύπλοκους κρυστάλλους αυτό δεν είναι δυνατόν.

Ας σκεφτούμε πιο πολύπλοκους κρυστάλλους

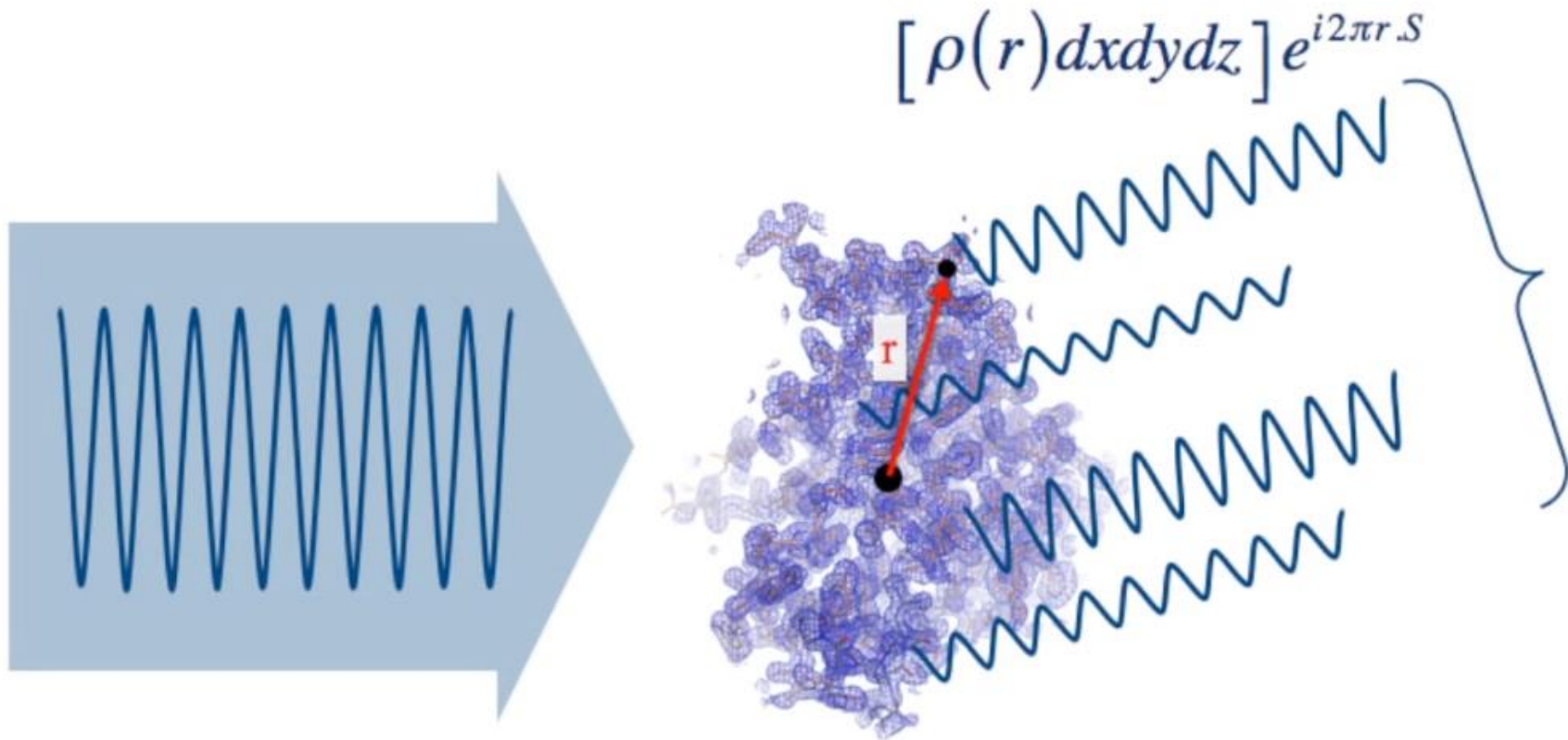


Περίθλαση από ένα πρωτεϊνικό μόριο



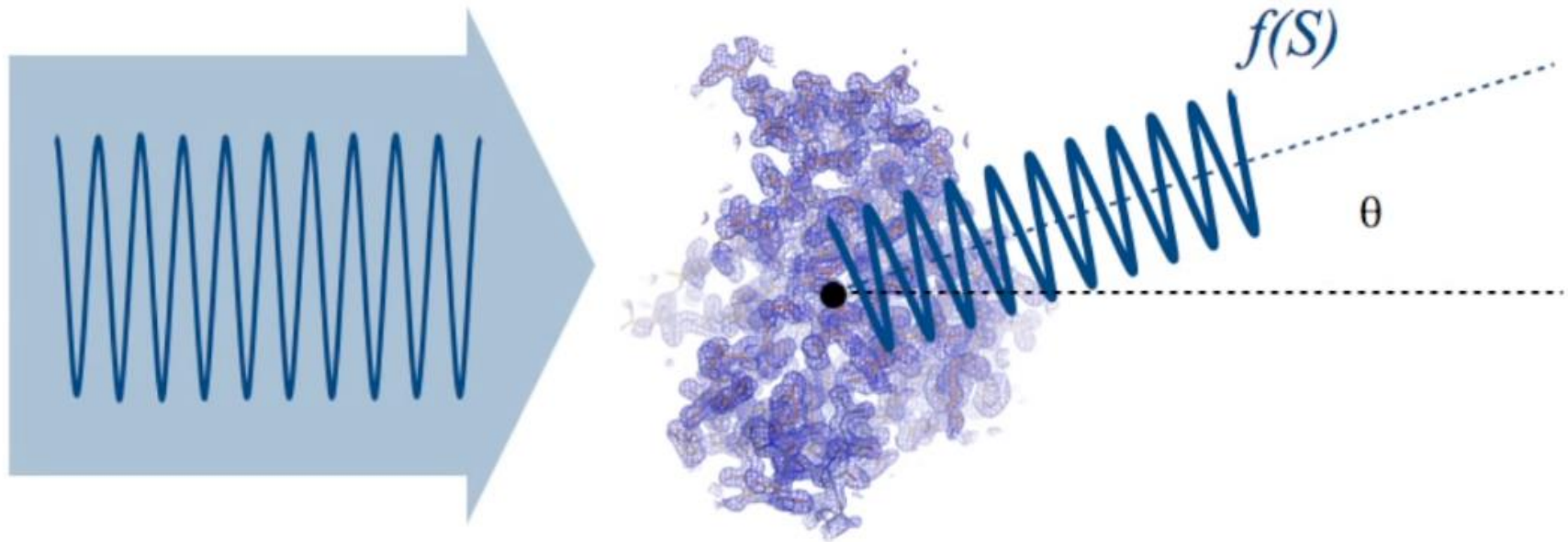
Κάθε μέρος του μορίου περιθλά προς **κάθε** κατεύθυνση

Περίθλαση από ένα πρωτεϊνικό μόριο



Ας θεωρήσουμε τη **συνολική** περίθλαση σε **μία μόνο** κατεύθυνση

Περίθλαση από ένα πρωτεϊνικό μόριο

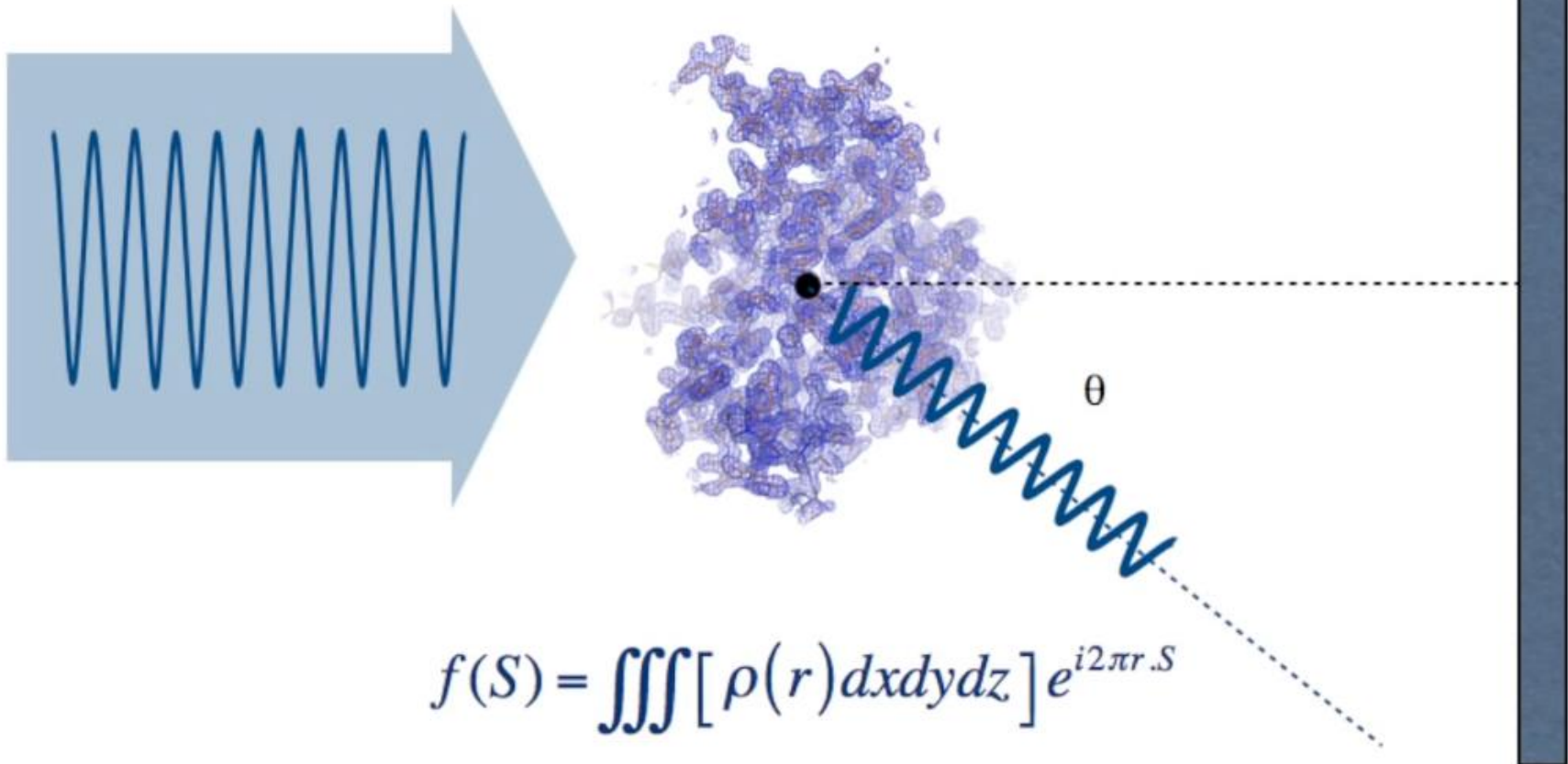


$$f(S) = \iiint [\rho(r) dx dy dz] e^{i2\pi r \cdot S}$$

Προσθέτουμε όλες τις συνιστώσες για να βρούμε τη συνολική περίθλαση σε μία κατεύθυνση

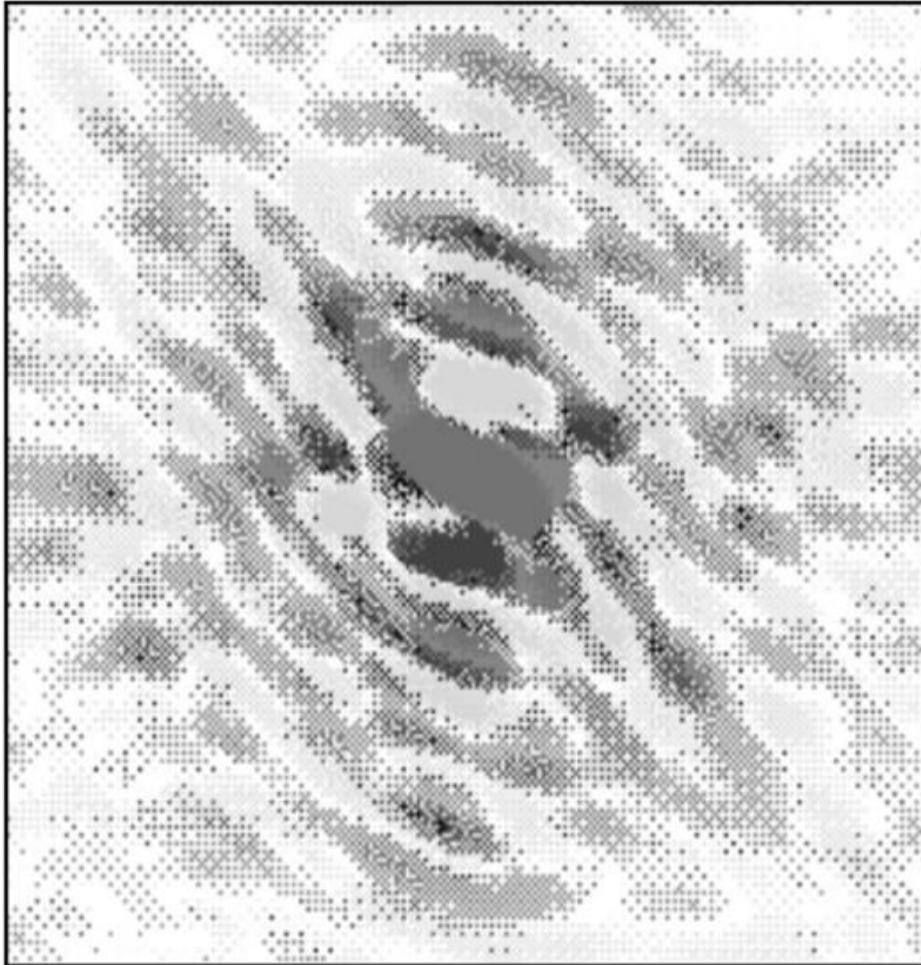
Περίθλαση από ένα πρωτεϊνικό μόριο

Ανιχνευτής



Συνολική περίθλαση σε μία κατεύθυνση

Περίθλαση από ένα πρωτεϊνικό μόριο



$$f(S) = \iiint \rho(r) e^{i2\pi r \cdot S} dx dy dz$$

K. Cowtan's Book of Fourier
(<http://www.ysbl.york.ac.uk/~cowtan/fourier/fourier.html>)

Ο Fourier και οι μετασχηματισμοί του



Jean-Baptiste Joseph Fourier
(1768-1830)

«...ο τρόπος με τον οποίο ο συγγραφέας οδηγείται στις εξισώσεις του δεν είναι απλός, εντούτοις η συγκρότηση τους φανερώνει κάτι ελκυστικό...»

French Academy of Sciences (1811)

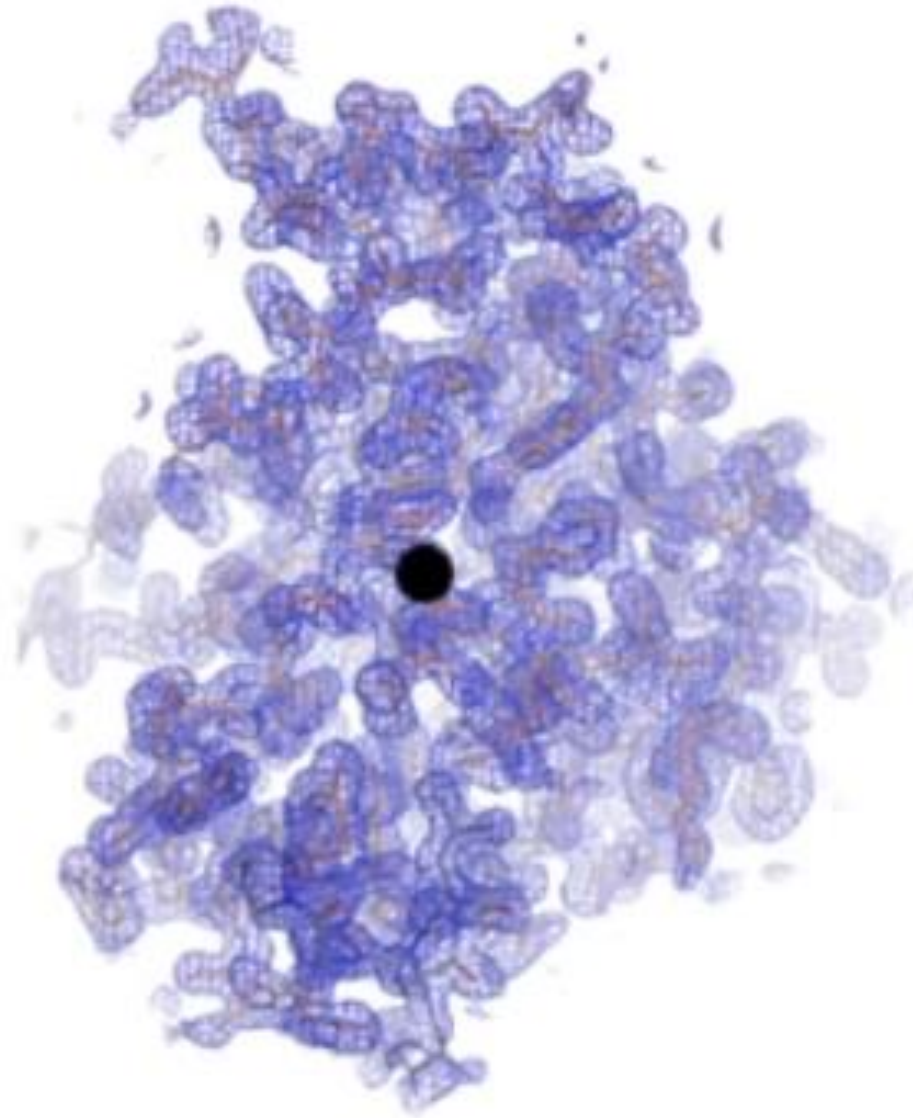
$$f(S) = \iiint \rho(r) e^{i2\pi r \cdot S} dx dy dz$$

‘ «...ένα από τα πλέον όμορφα αποτελέσματα στη σύγχρονη ανάλυση...»

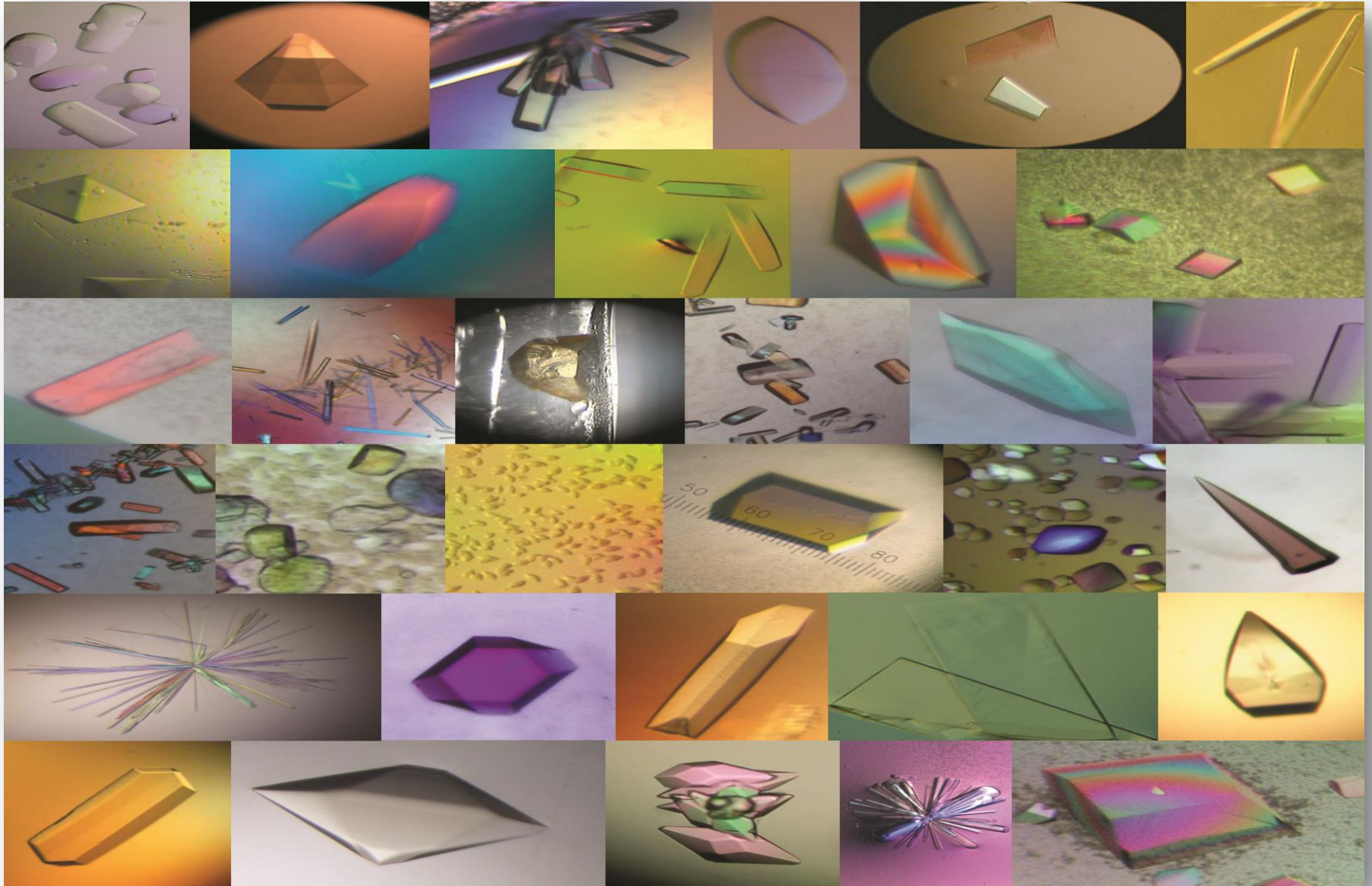
Lord Kelvin (1867)

$$\rho(r) = \iiint f(S) e^{-i2\pi r \cdot S} dS$$

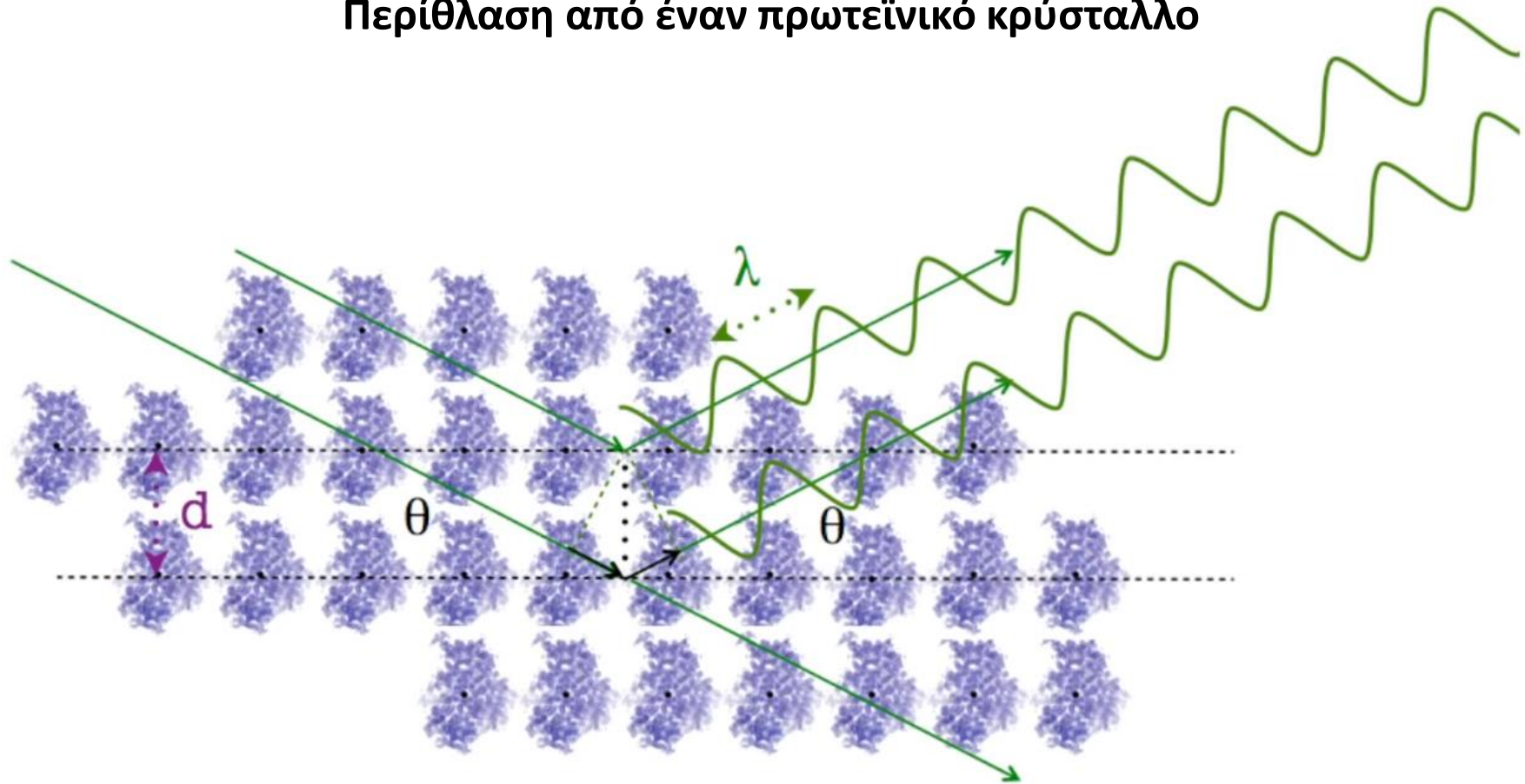
Περίθλαση από έναν πρωτεϊνικό κρύσταλλο



Περίθλαση από έναν πρωτεϊνικό κρύσταλλο



Περίθλαση από έναν πρωτεϊνικό κρύσταλλο

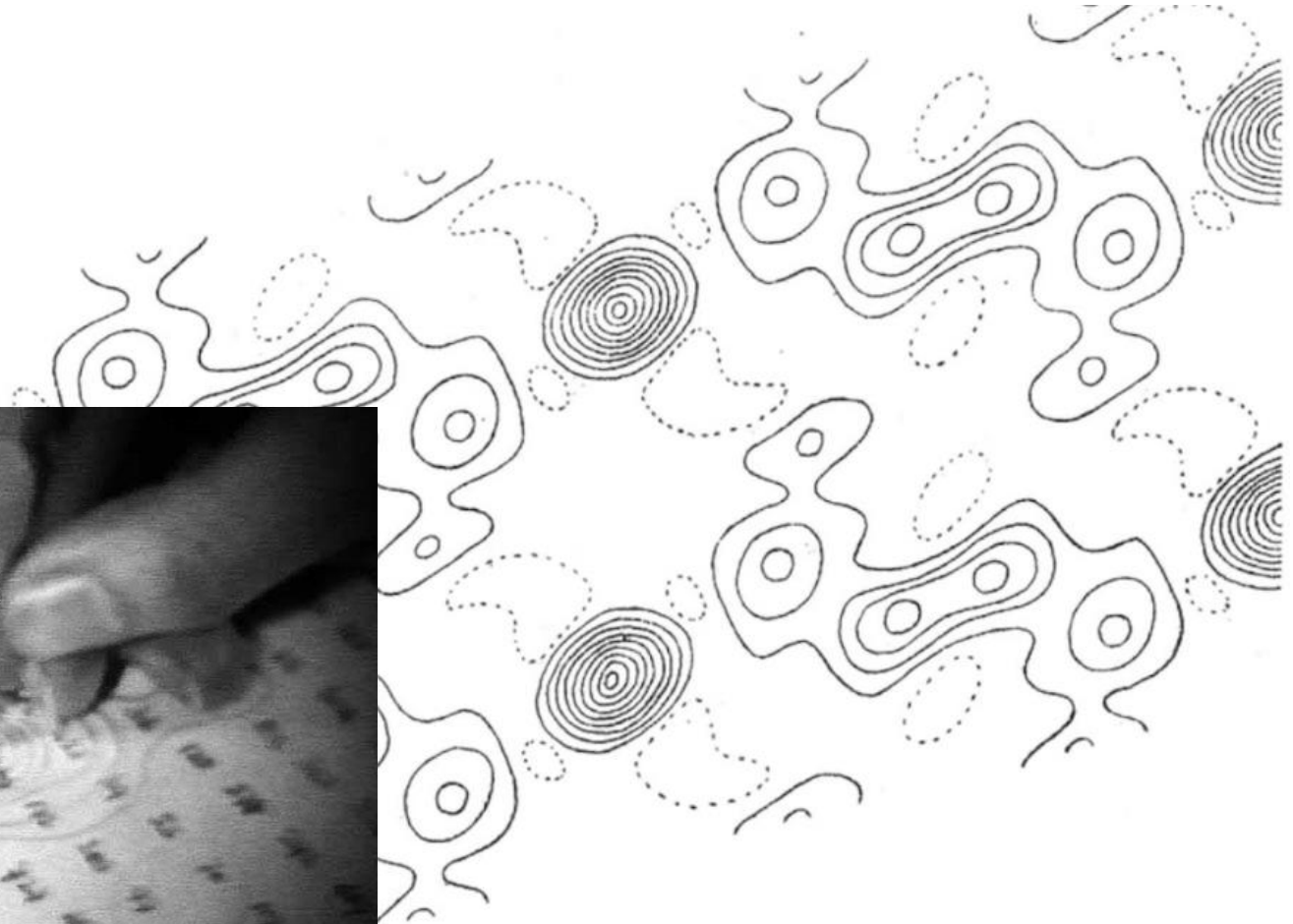


Ισχύει ο νόμος του Bragg

$$2d \sin \theta = n\lambda$$



Diopside
 $\text{CaMg}(\text{SiO}_3)_2$

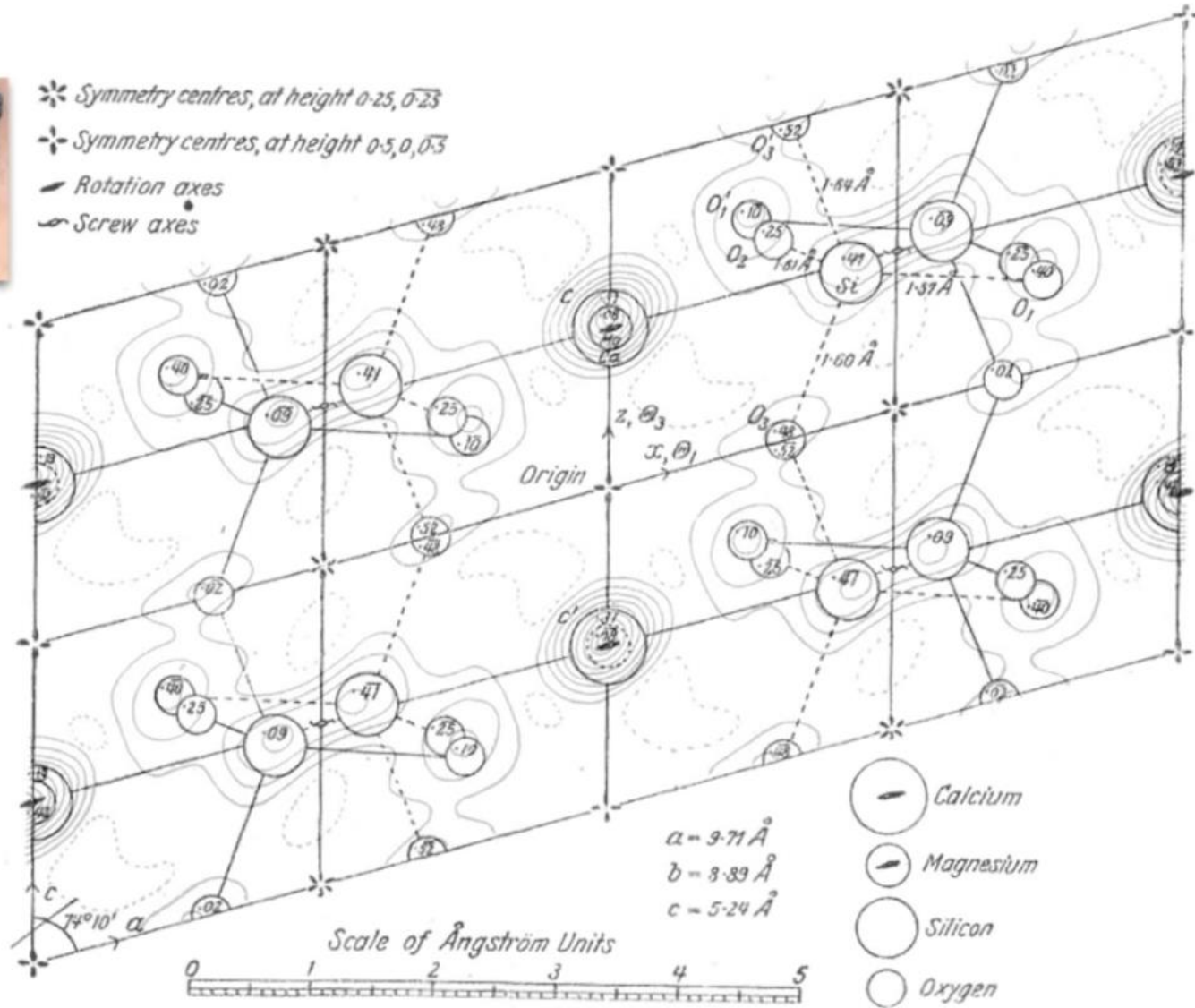


Bragg, WL (1929) Proc. R. Soc. Lond. A 123, 537-559

Περίθλαση από κρυστάλλους μεγάλων μορίων



Diopside
 $\text{CaMg}(\text{SiO}_3)_2$



Bragg, WL (1929) Proc. R. Soc. Lond. A 123, 537-559

Penicillin (1945)



12/5/2014: 104^η επέτειο της γέννηση της Dorothy Hodgkin Crowfoot



Photographed at London's Science Museum

The screenshot shows the Cambridge Structural Database website. At the top, there are navigation links: COMMUNITY, RESEARCH & CONSULTANCY, SOLUTIONS (highlighted in red), NEWS & EVENTS, SUPPORT & RESOURCES, and CCDC. A 'Website Feedback' form is also present. Below the navigation is a red banner. The main content area includes a breadcrumb trail: Home / Solutions / CSD System / CSD (Cambridge Structural Database). A red and white icon is followed by the text: 'Comprehensive of the published literature and highly curated, the Cambridge Structural Database (CSD) is an essential resource to scientists around the world.' Below this is a paragraph: 'Established in 1965, the CSD is the world's repository for small-molecule organic and metal-organic crystal structures. Containing the results of over half-a-million x-ray and neutron diffraction analyses this unique database of accurate 3D structures has become an essential resource to scientists around the world.' Another paragraph follows: 'With comprehensive and fully retrospective coverage of the published literature you can have full confidence that your CSD searches are returning all crystal structure matches. The CSD also contains directly deposited data that are not available anywhere else.' To the right of the text is a vertical menu with six items: 'Download CSD System case studies', 'Read the CSD System data sheet', 'Take the next step: request an evaluation', 'View CSD statistics', 'View the CSD user guide, tutorials and technical documentation', and 'Visit CSD Support Page'. At the bottom left is a bar chart showing the growth of the CSD since 1970. At the bottom right is a ball-and-stick model of the Lamotrigine (EFEMUX01) molecule, with the caption: 'Lamotrigine (EFEMUX01) - the 500,000th structure archived to the CSD'.

Home / Solutions / CSD System / CSD (Cambridge Structural Database)

Comprehensive of the published literature and highly curated, the Cambridge Structural Database (CSD) is an essential resource to scientists around the world

Established in 1965, the CSD is the world's repository for small-molecule organic and metal-organic crystal structures. Containing the results of over half-a-million x-ray and neutron diffraction analyses this unique database of accurate 3D structures has become an essential resource to scientists around the world.

With comprehensive and fully retrospective coverage of the published literature you can have full confidence that your CSD searches are returning all crystal structure matches. The CSD also contains directly deposited data that are not available anywhere else.

Download CSD System case studies

Read the CSD System data sheet

Take the next step: request an evaluation

View CSD statistics

View the CSD user guide, tutorials and technical documentation

Visit CSD Support Page

Growth of the Cambridge Structural Database (CSD) since 1970.

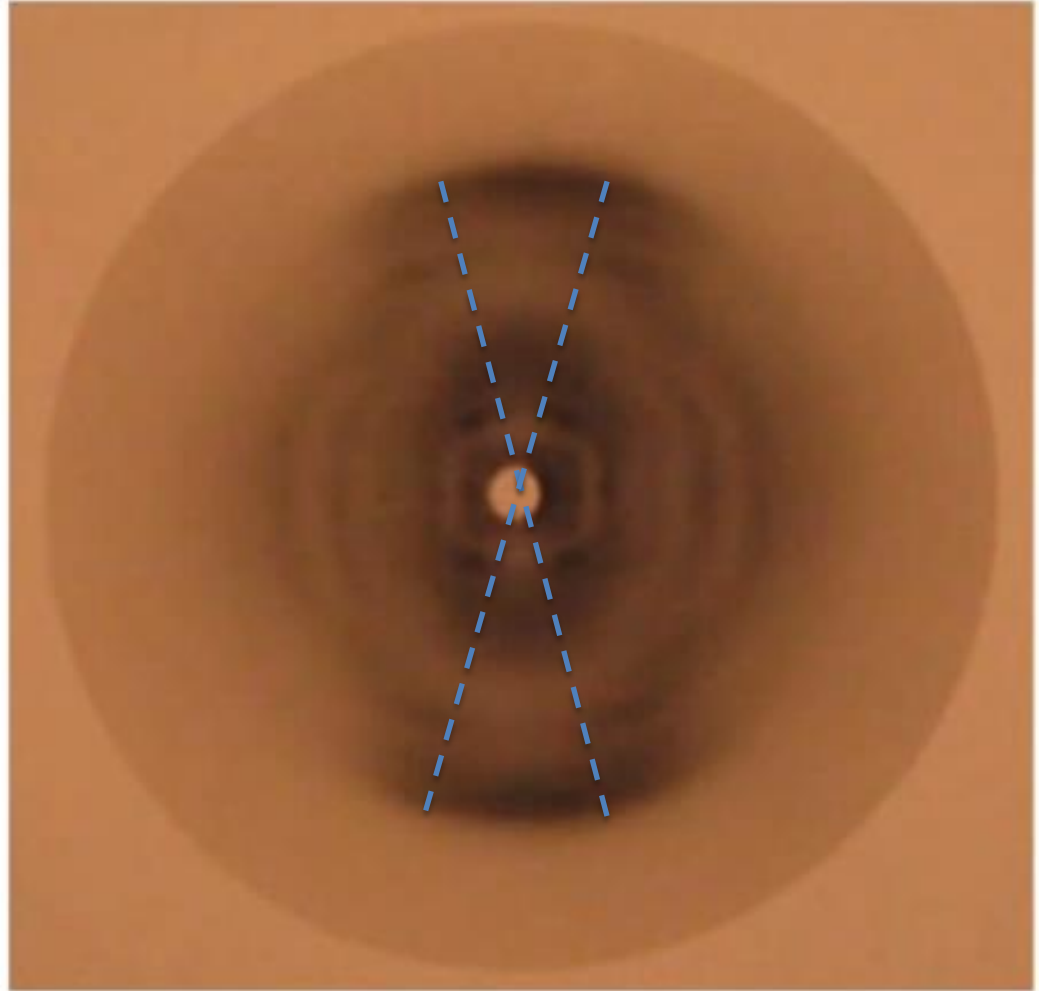
Lamotrigine (EFEMUX01) - the 500,000th structure archived to the CSD

>500,000 crystal structures
>40,000 added each year

Δ.Δ. Λεωνίδας



Bill Astbury & Florence Bell



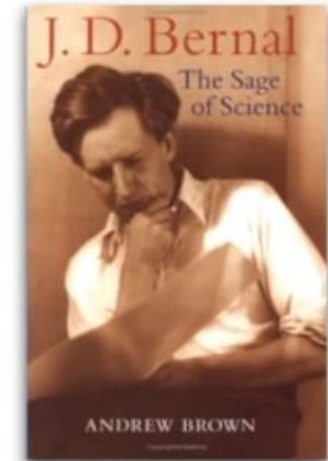
DNA diffraction pattern (circa 1938)

Κρύσταλλοι πεψίνης (1934)

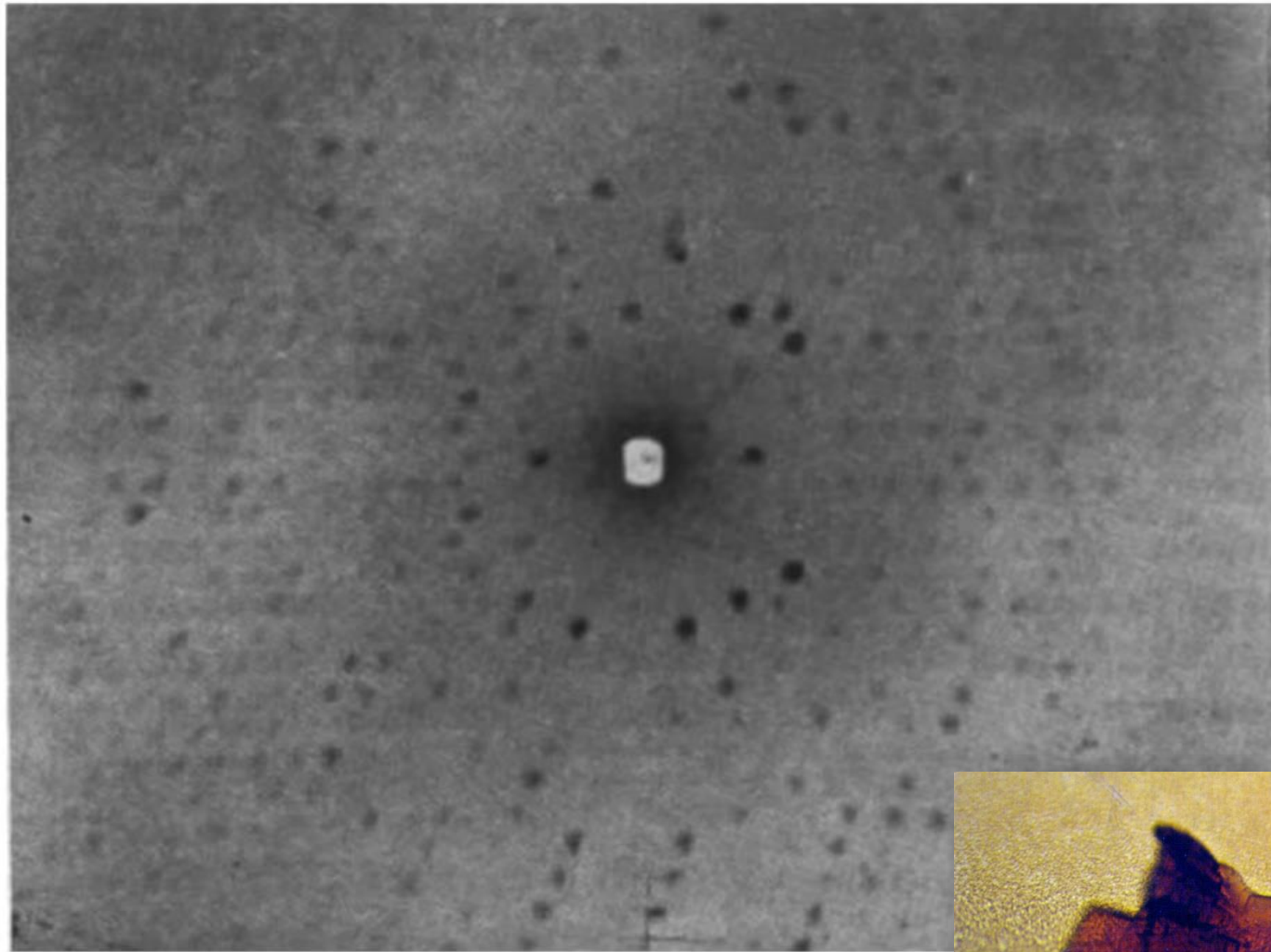
Bernal and Crowfoot (1934) *Nature*, **133**, 794-5

X-Ray Photographs of Crystalline Pepsin

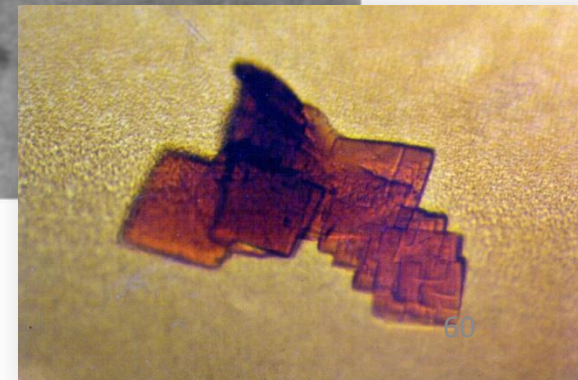
FOUR weeks ago, Dr. G. Millikan brought us some crystals of pepsin prepared by Dr. Philpot in the laboratory of Prof. The Svedberg, Uppsala. They are in the form of perfect hexagonal bipyramids



Πρώτο περιθλασίγραμμα από κρυστάλλους πρωτεΐνης

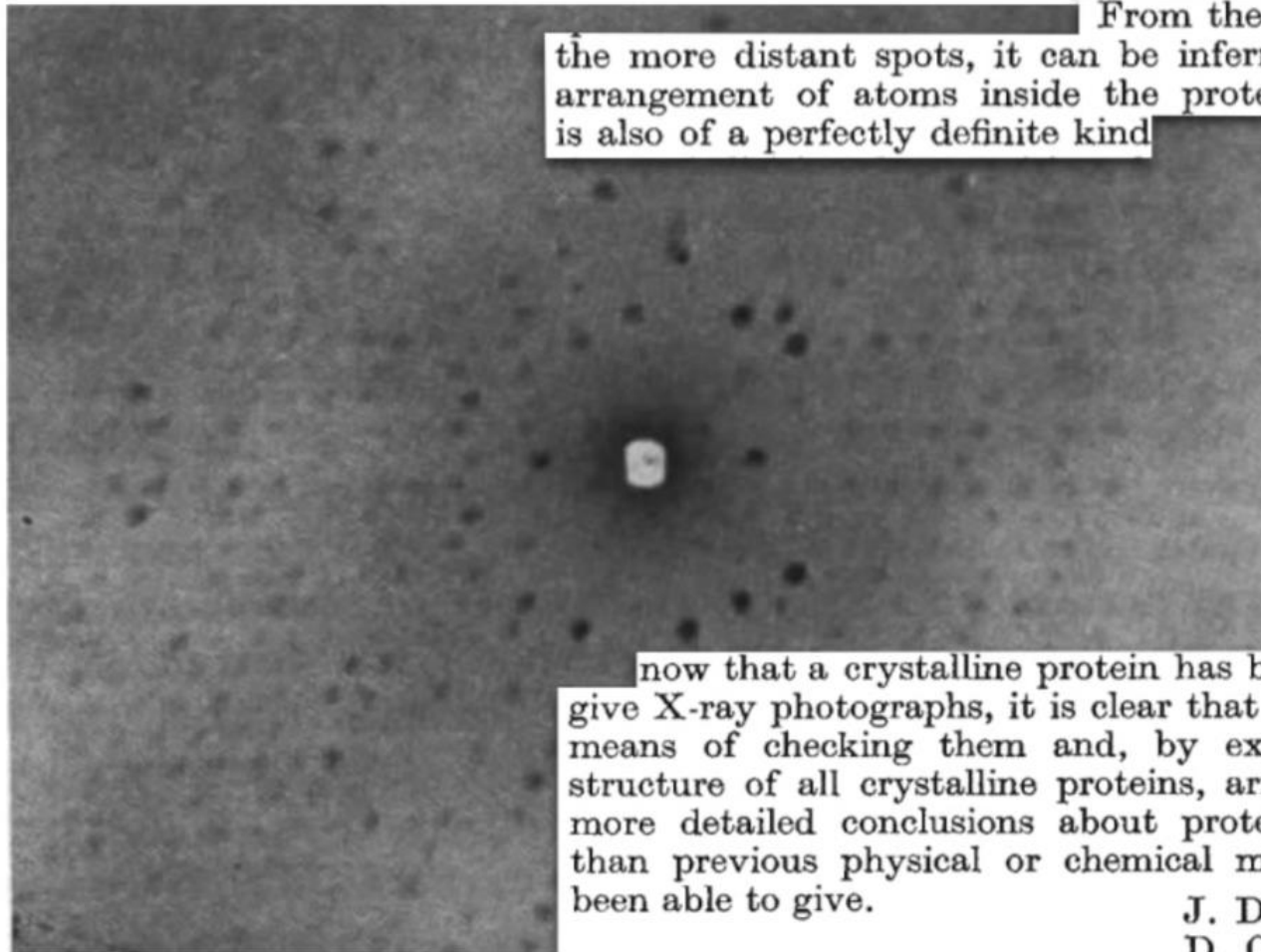


Haemoglobin crystal -1938 (wet)



Πρώτο περιθλασίγραμμα από κρυστάλλους πρωτεΐνης

Bernal and Crowfoot (1934) Nature, **133**, 794-8



From the intensity of the more distant spots, it can be inferred that the arrangement of atoms inside the protein molecule is also of a perfectly definite kind

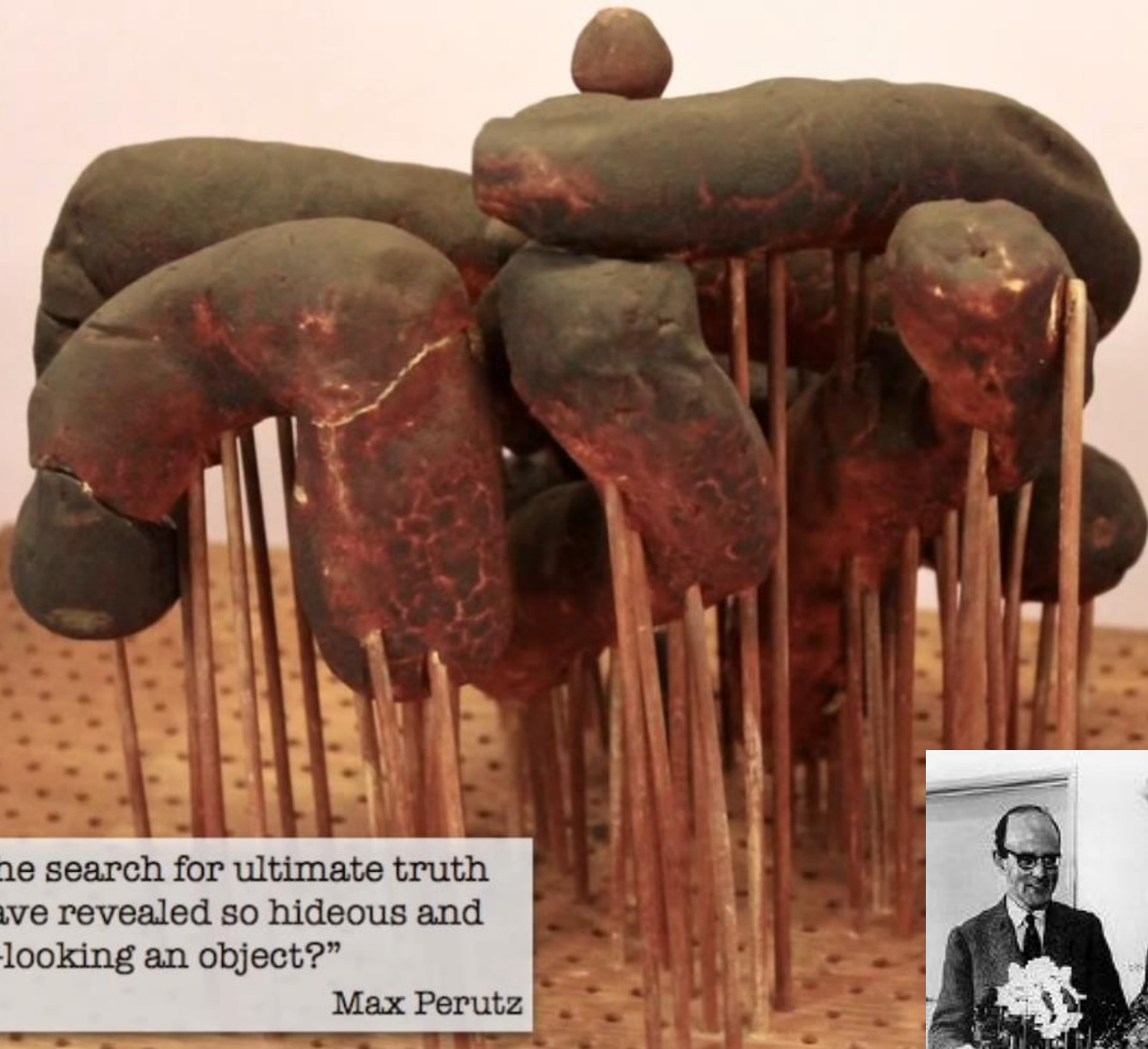
now that a crystalline protein has been made to give X-ray photographs, it is clear that we have the means of checking them and, by examining the structure of all crystalline proteins, arriving at far more detailed conclusions about protein structure than previous physical or chemical methods have been able to give.

J. D. BERNAL.
D. CROWFOOT.

Haemoglobin crystal -1938 (wet)

Myoglobin structure (1959)

Photographed at London's Science Museum



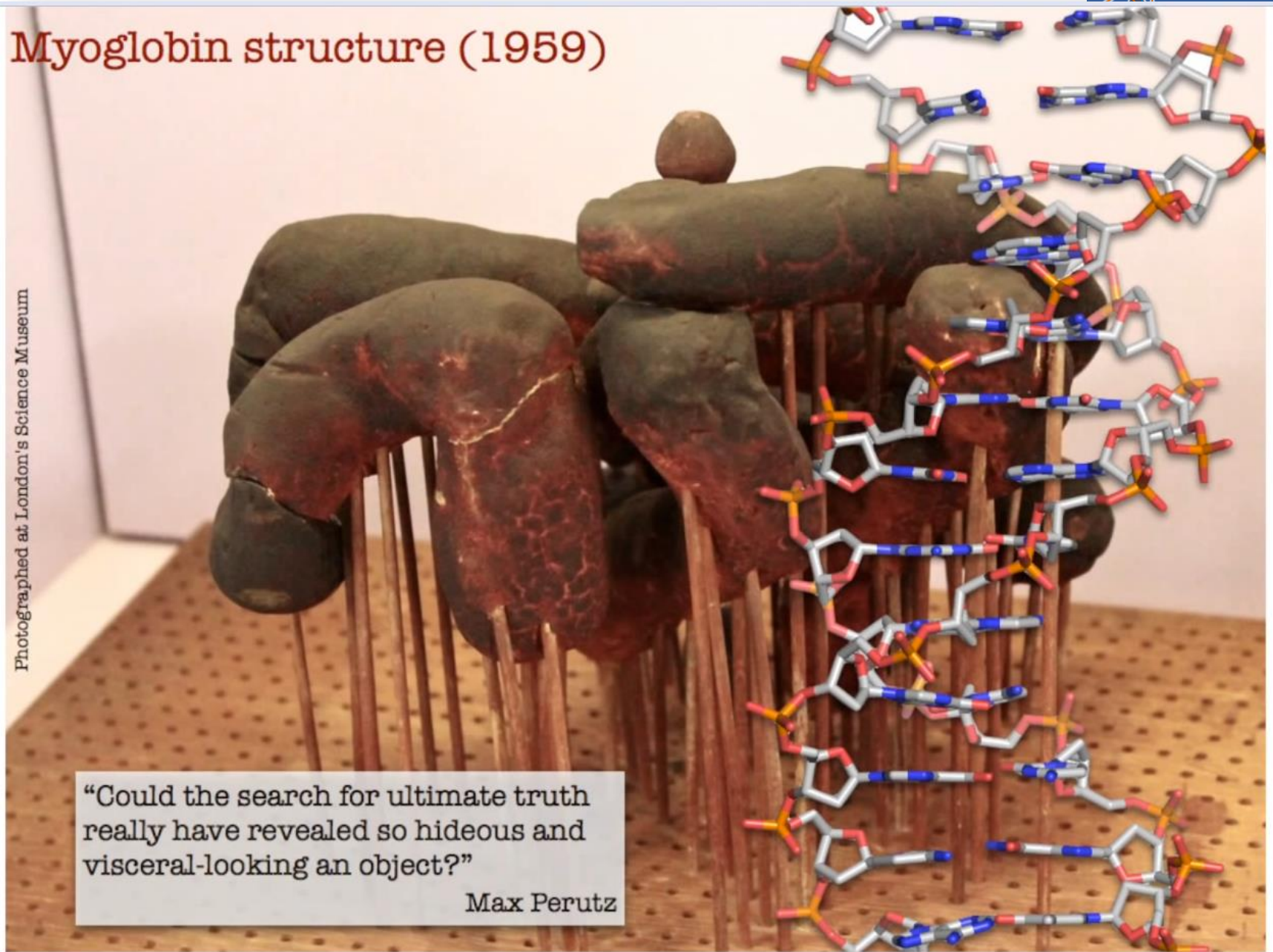
“Could the search for ultimate truth really have revealed so hideous and visceral-looking an object?”

Max Perutz



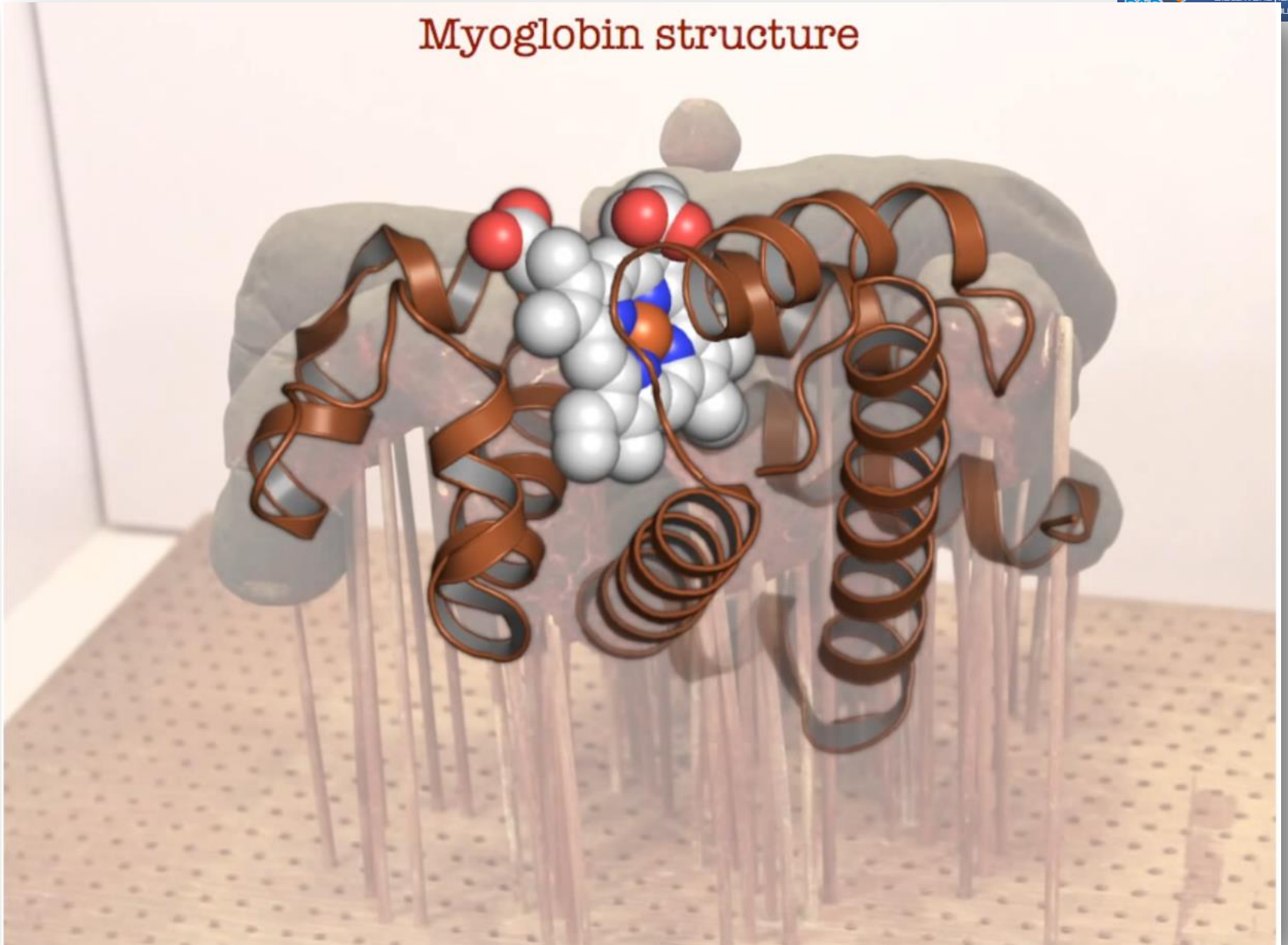
Myoglobin structure (1959)

Photographed at London's Science Museum

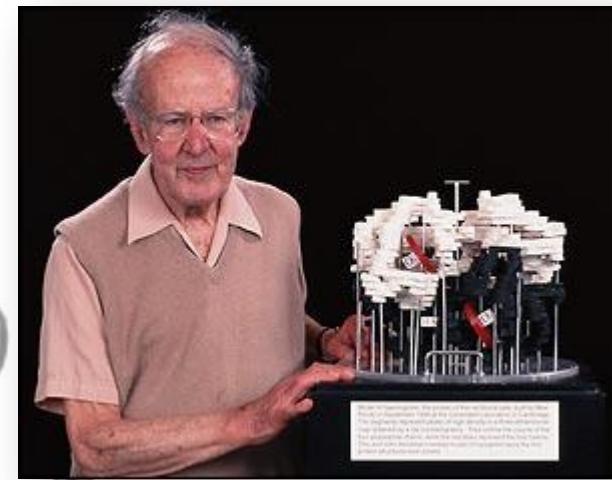
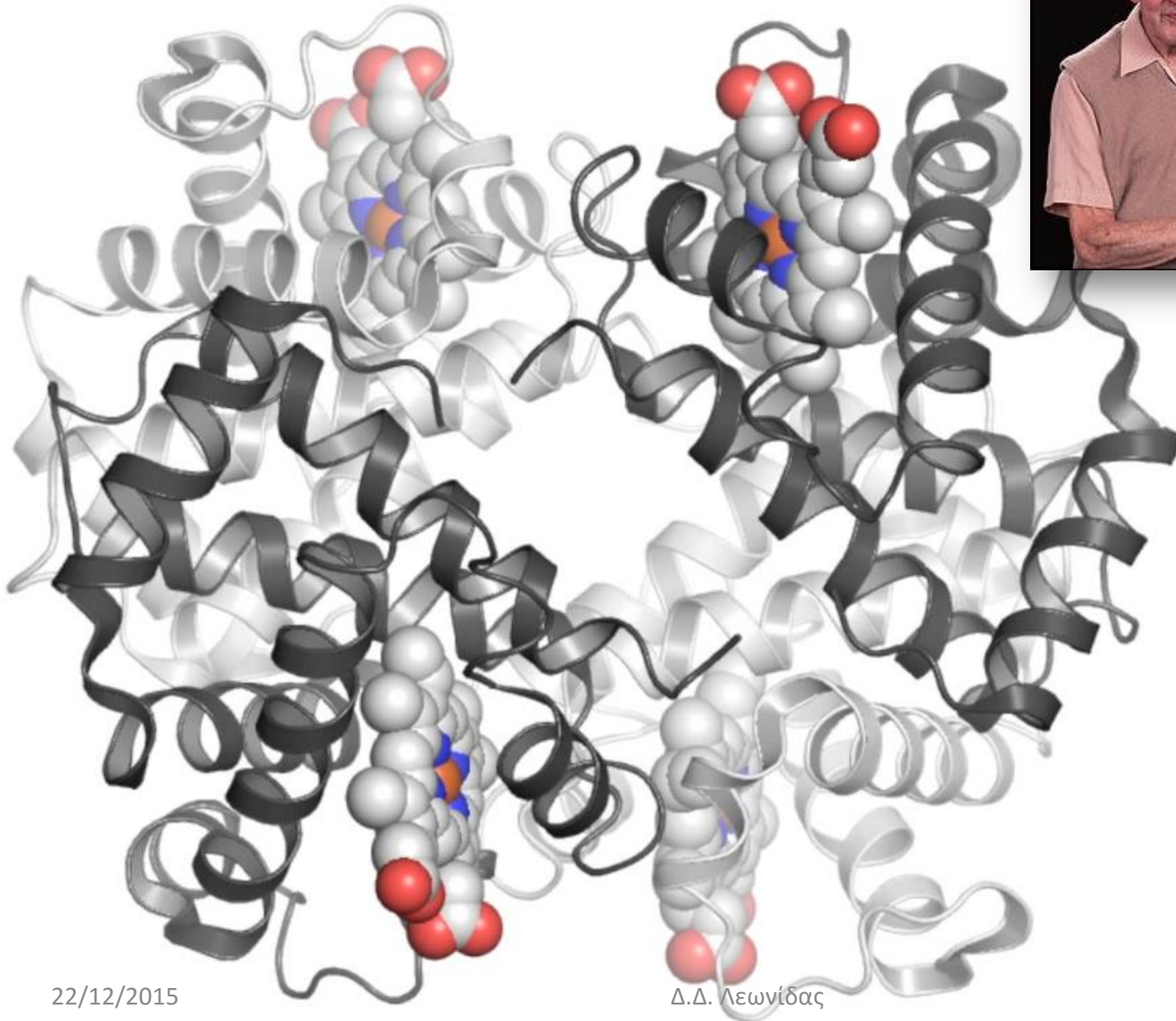


“Could the search for ultimate truth really have revealed so hideous and visceral-looking an object?”
Max Perutz

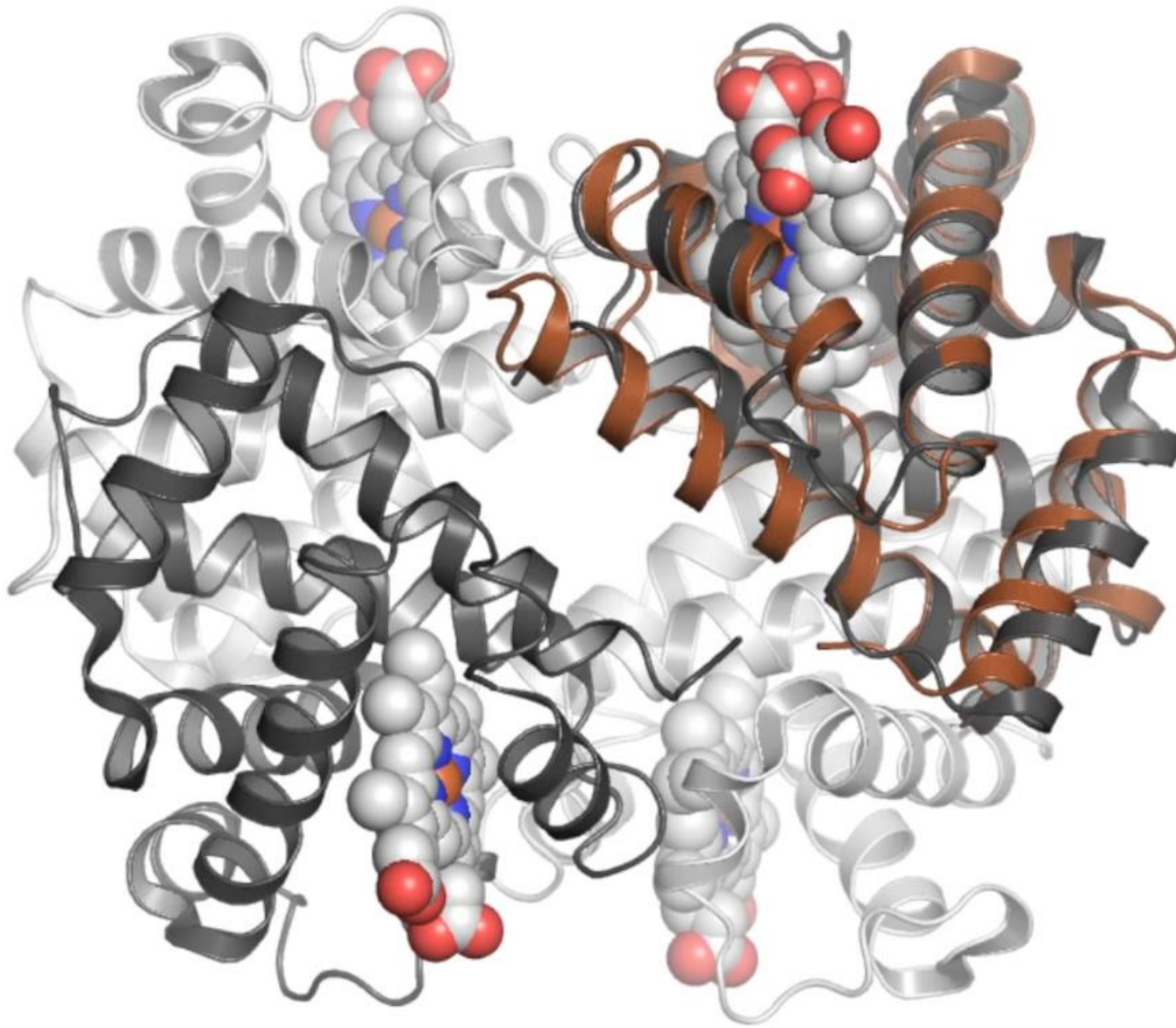
Myoglobin structure



Δομή της αιμοσφαιρίνης

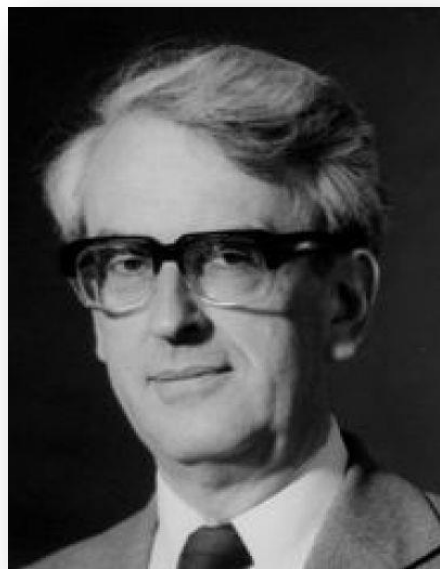


Δομή της αιμοσφαιρίνης (1962)

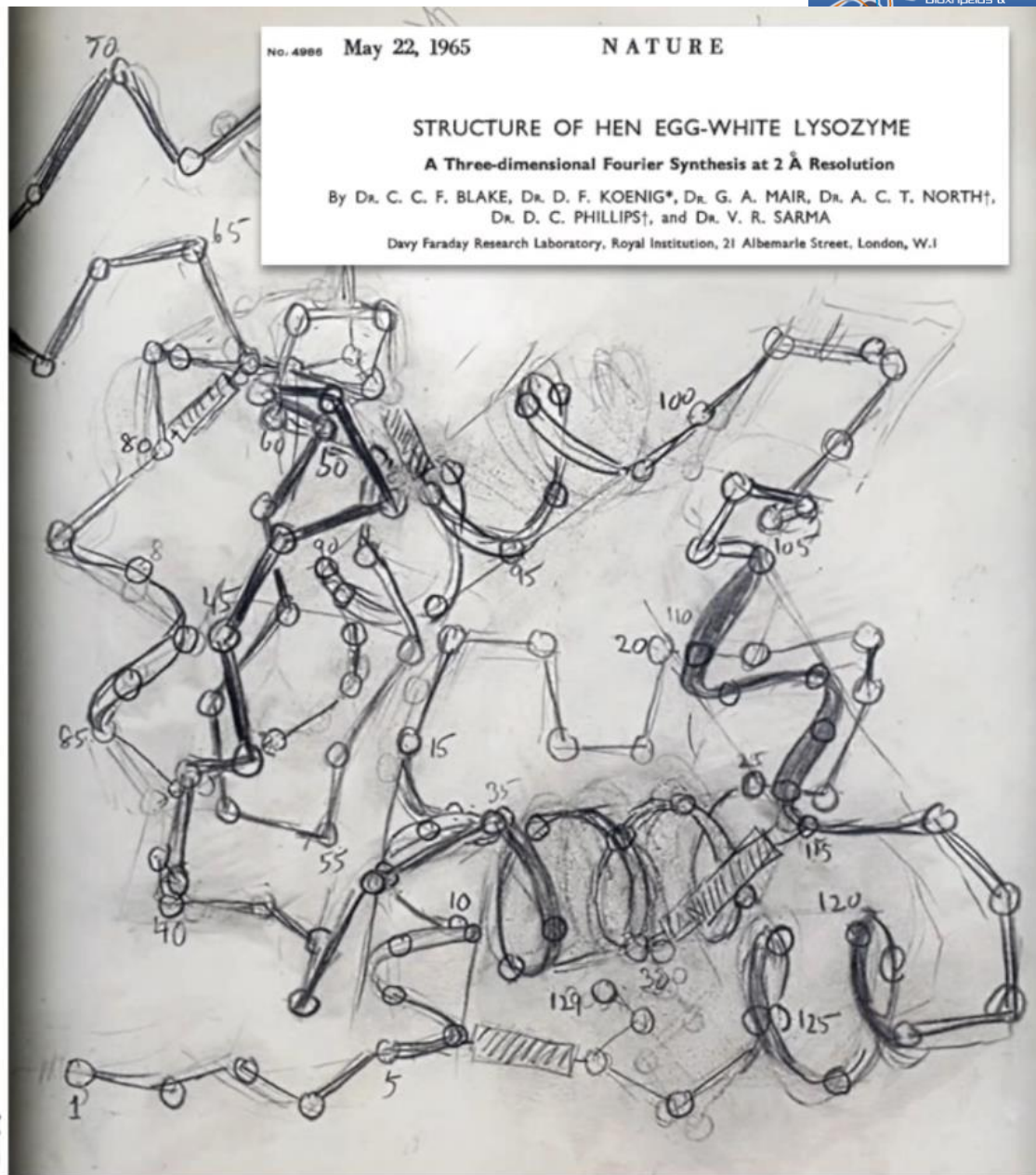


μυοσφαιρίνη

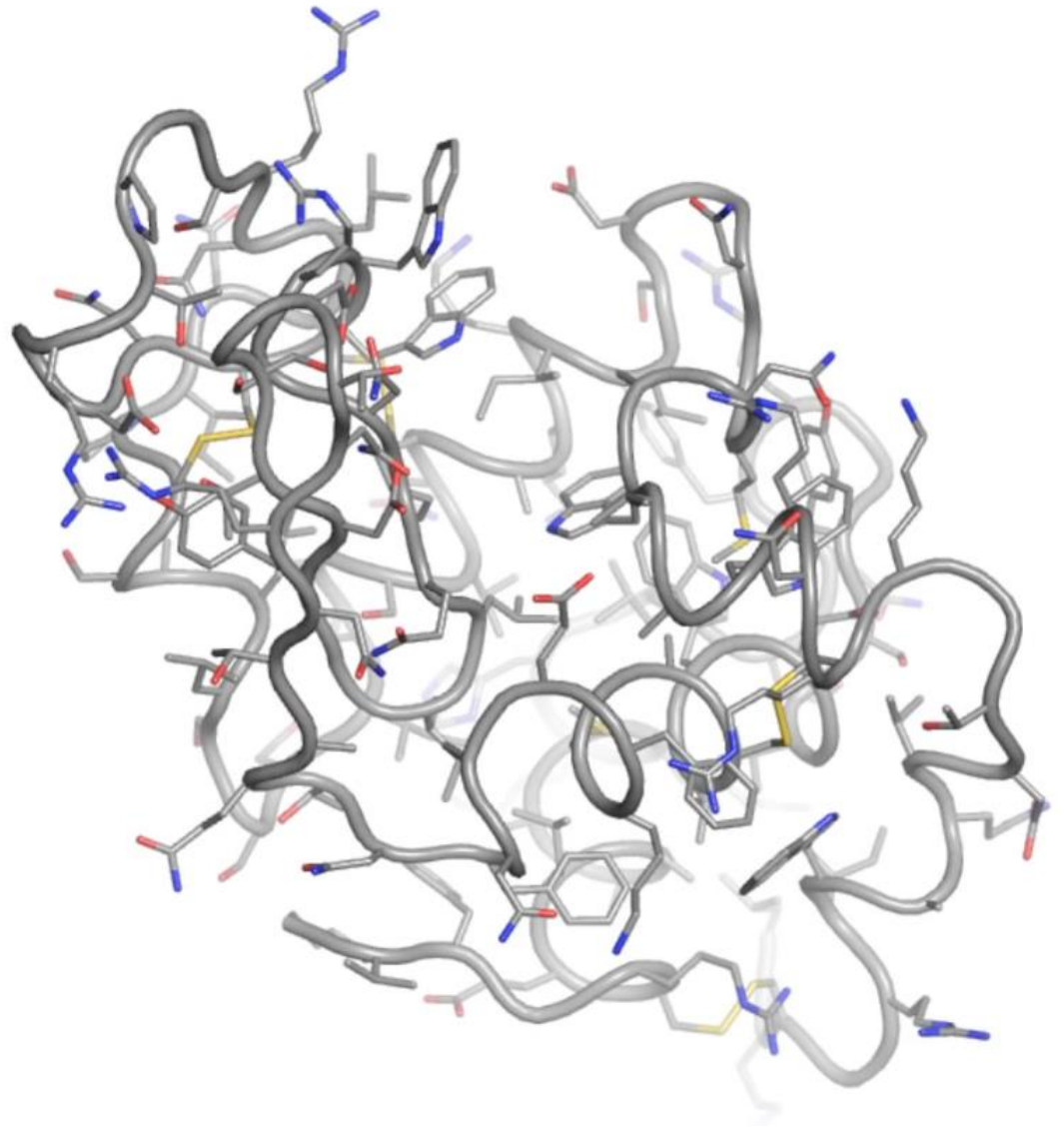
Λυσοζύμη



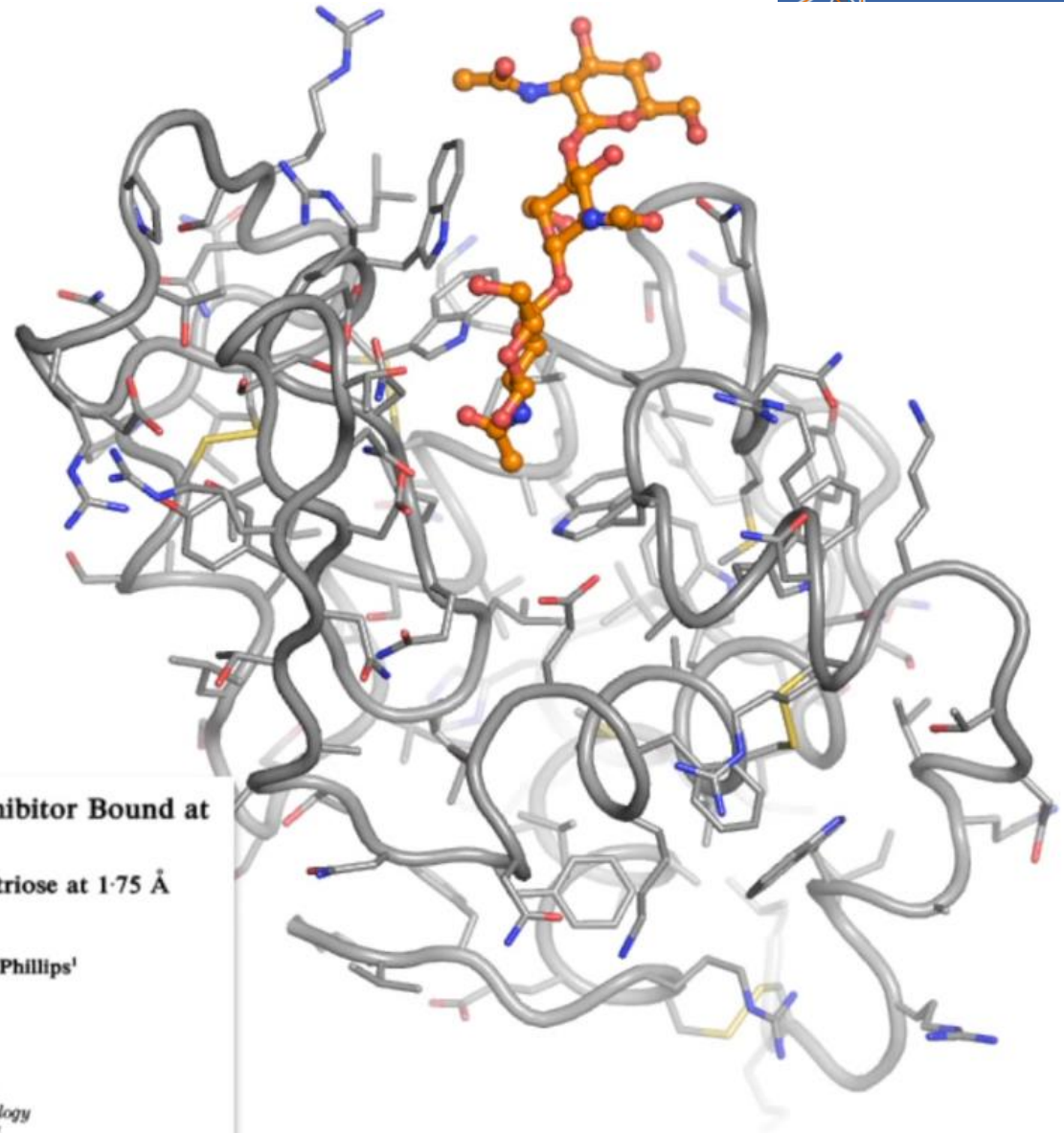
Drawing by WL Bragg
(RI Archive)



Λυσοζύμη



Λυσοζύμη



Refinement of an Enzyme Complex with Inhibitor Bound at Partial Occupancy

Hen Egg-white Lysozyme and tri-*N*-acetylchitotriose at 1.75 Å Resolution

J. C. Cheetham¹†, P. J. Artymiuk² and D. C. Phillips¹

¹Laboratory of Molecular Biophysics
University of Oxford, South Parks Road
Oxford OX1 3QU, England

²Krebs Institute for Biomolecular Research
Department of Molecular Biology and Biotechnology
The University, Sheffield S10 2TN, England

(Received 5 January 1991; accepted 28 June 1991)

The Diamond Light Source



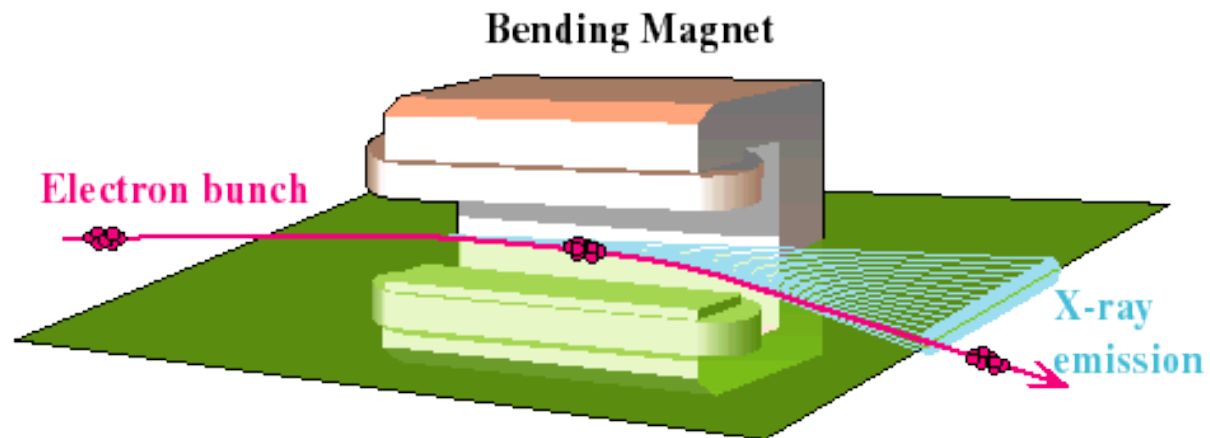
Image: Diamond Light Source

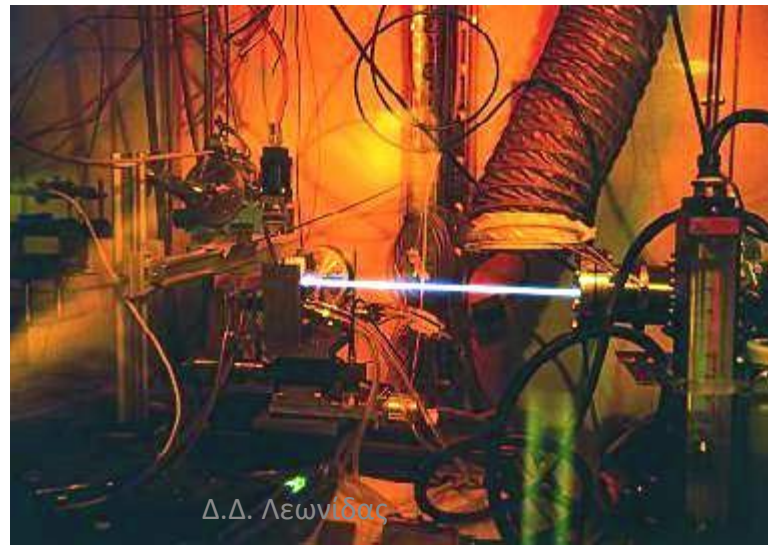
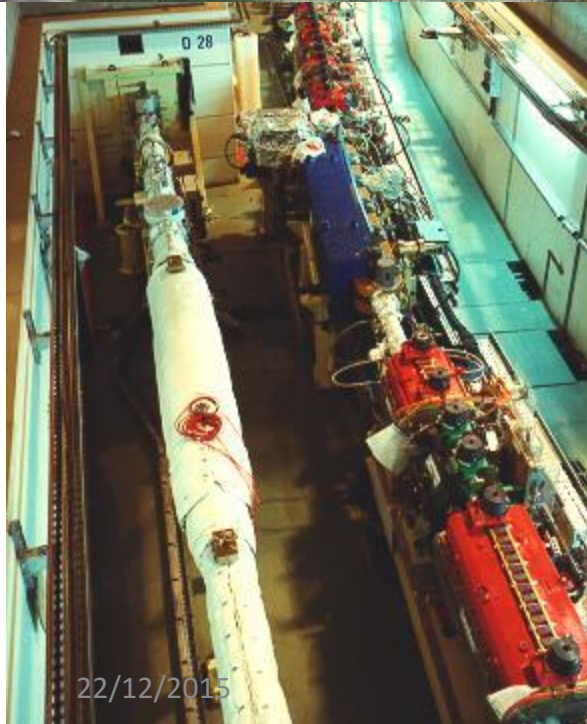
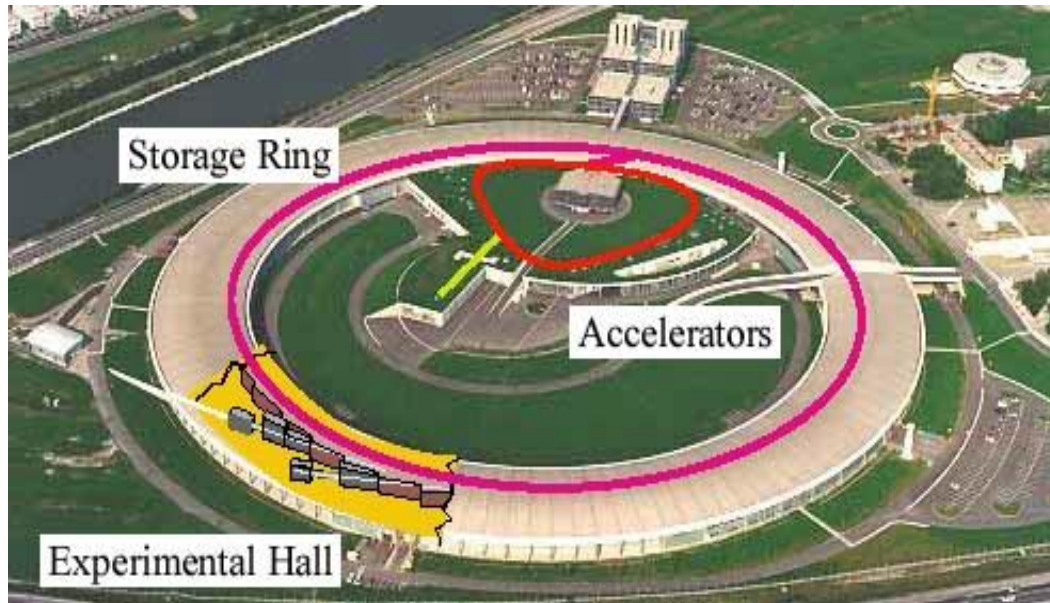


Elettra, Trieste, Italy

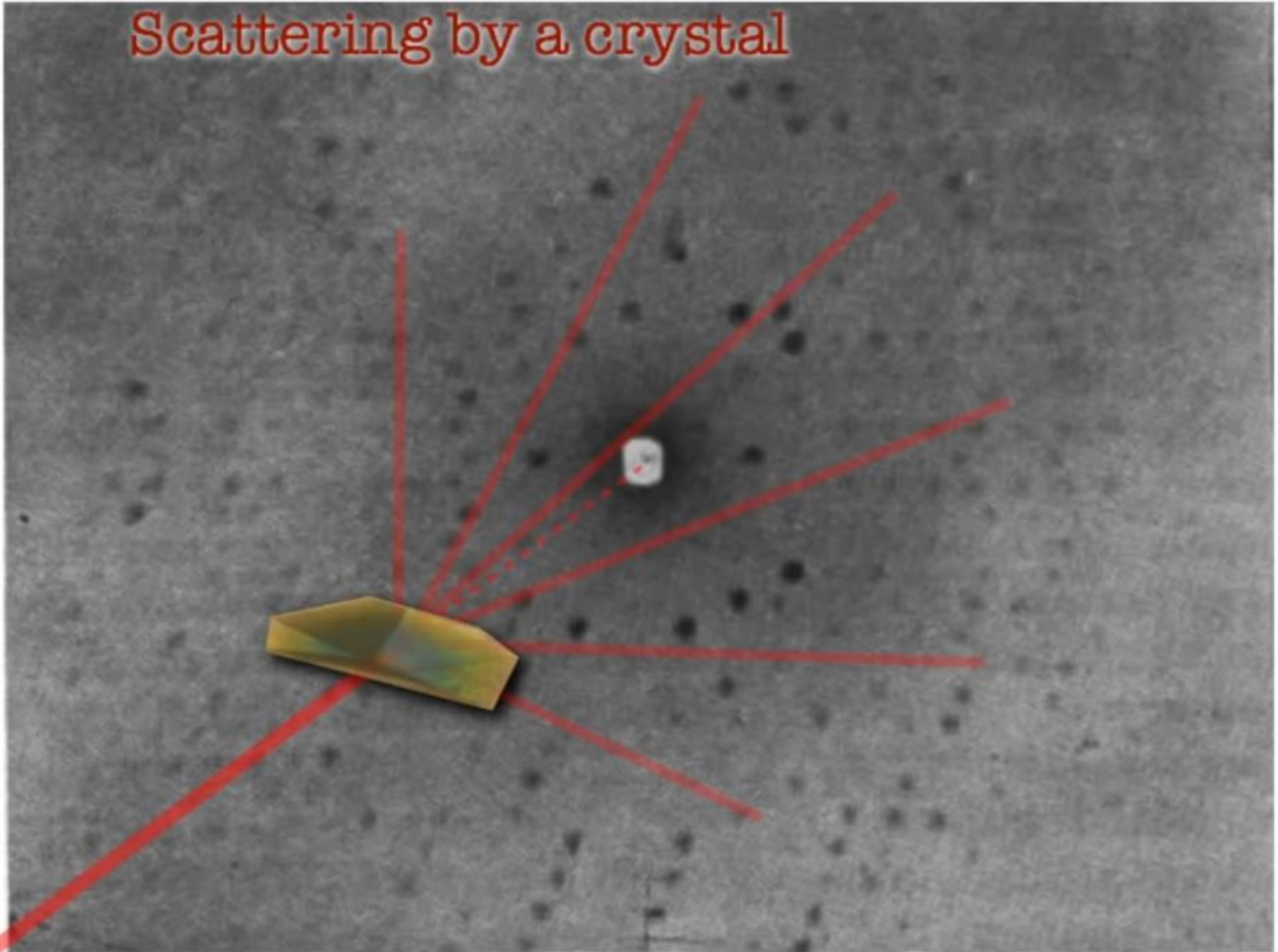


ESRF, Grenoble, France

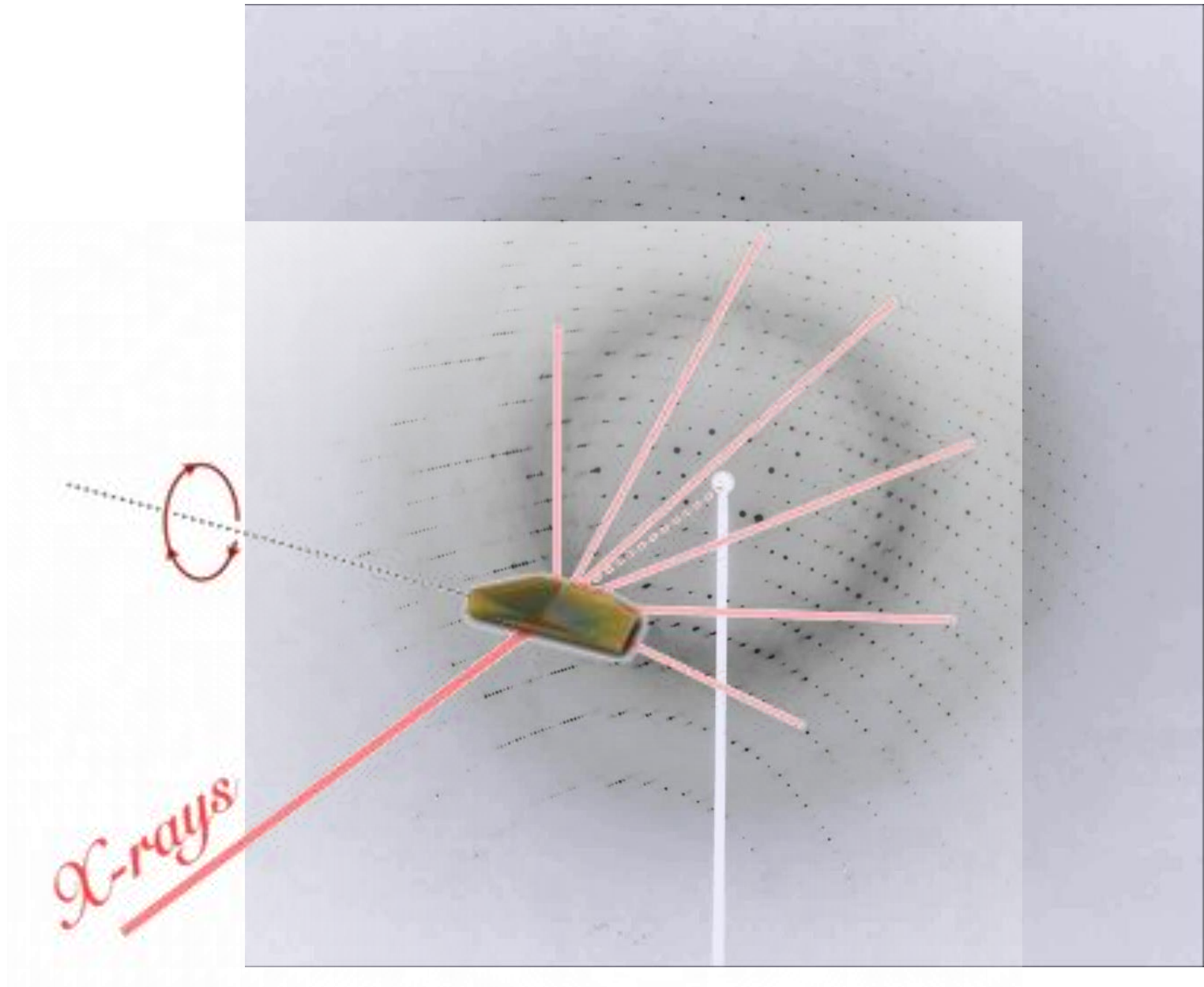




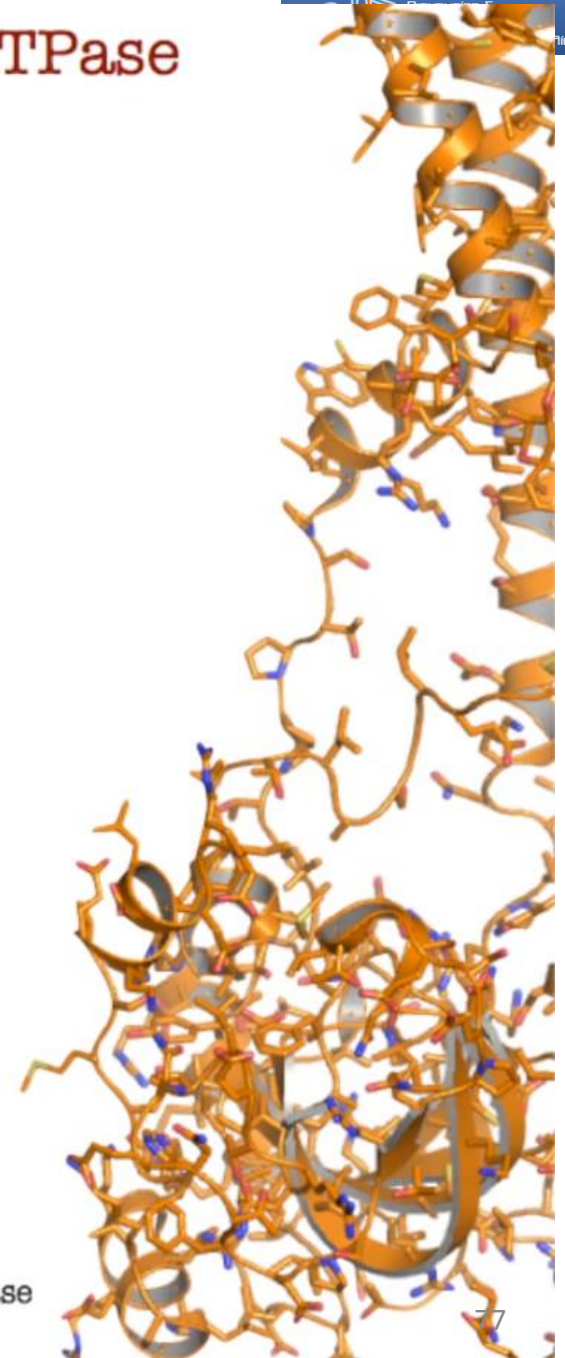
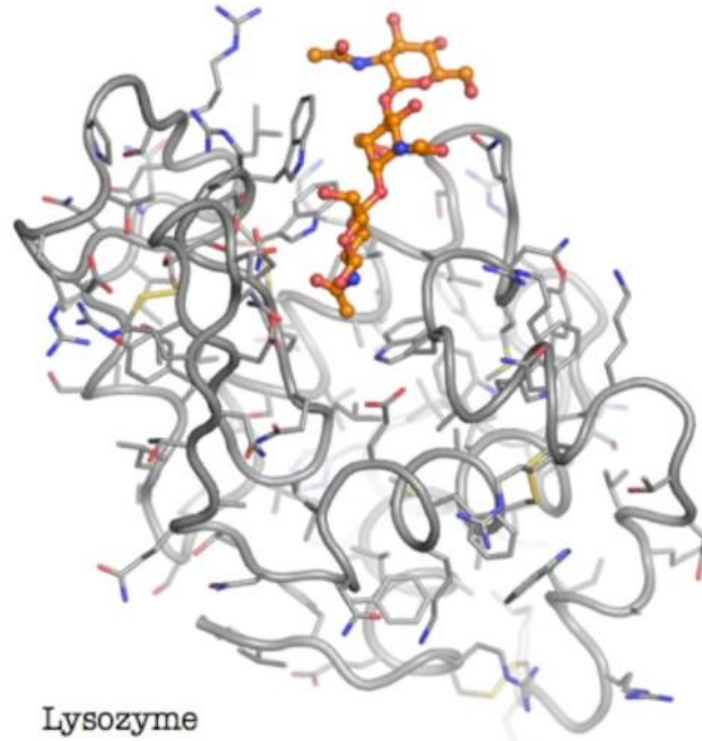
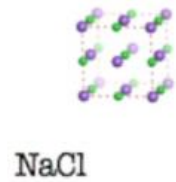
Scattering by a crystal



X-rays



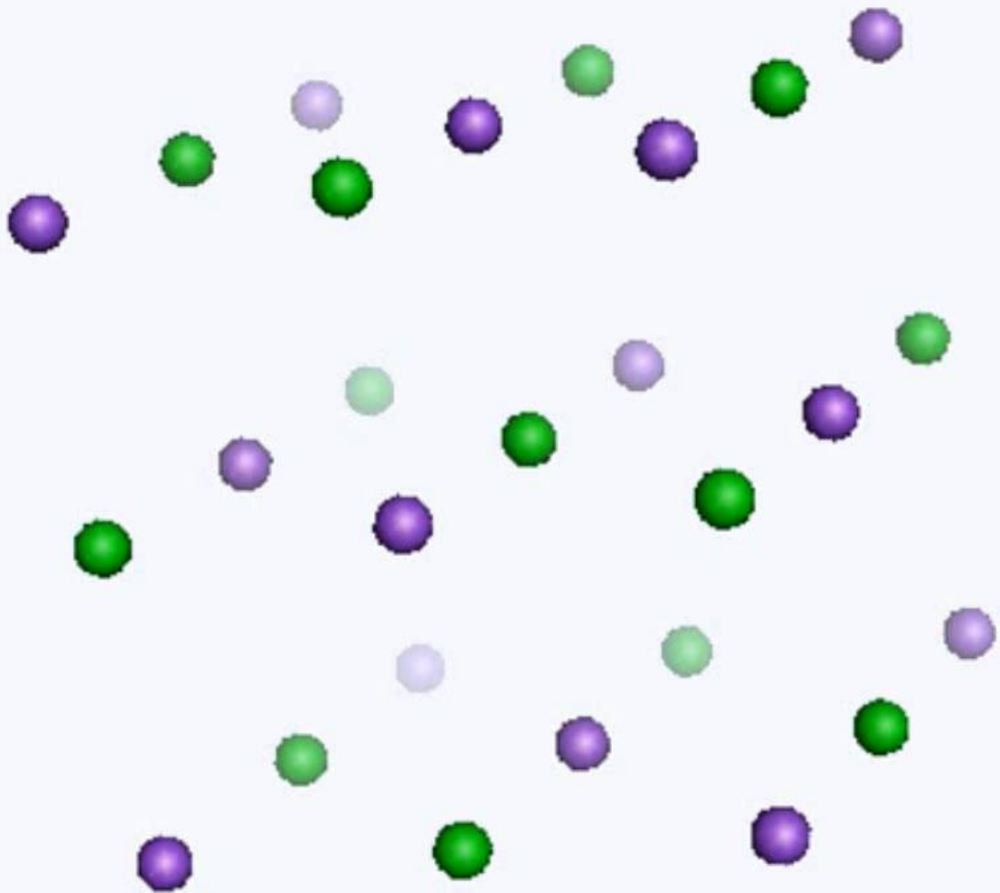
NaCl vs Lysozyme vs Na⁺,K⁺ATPase

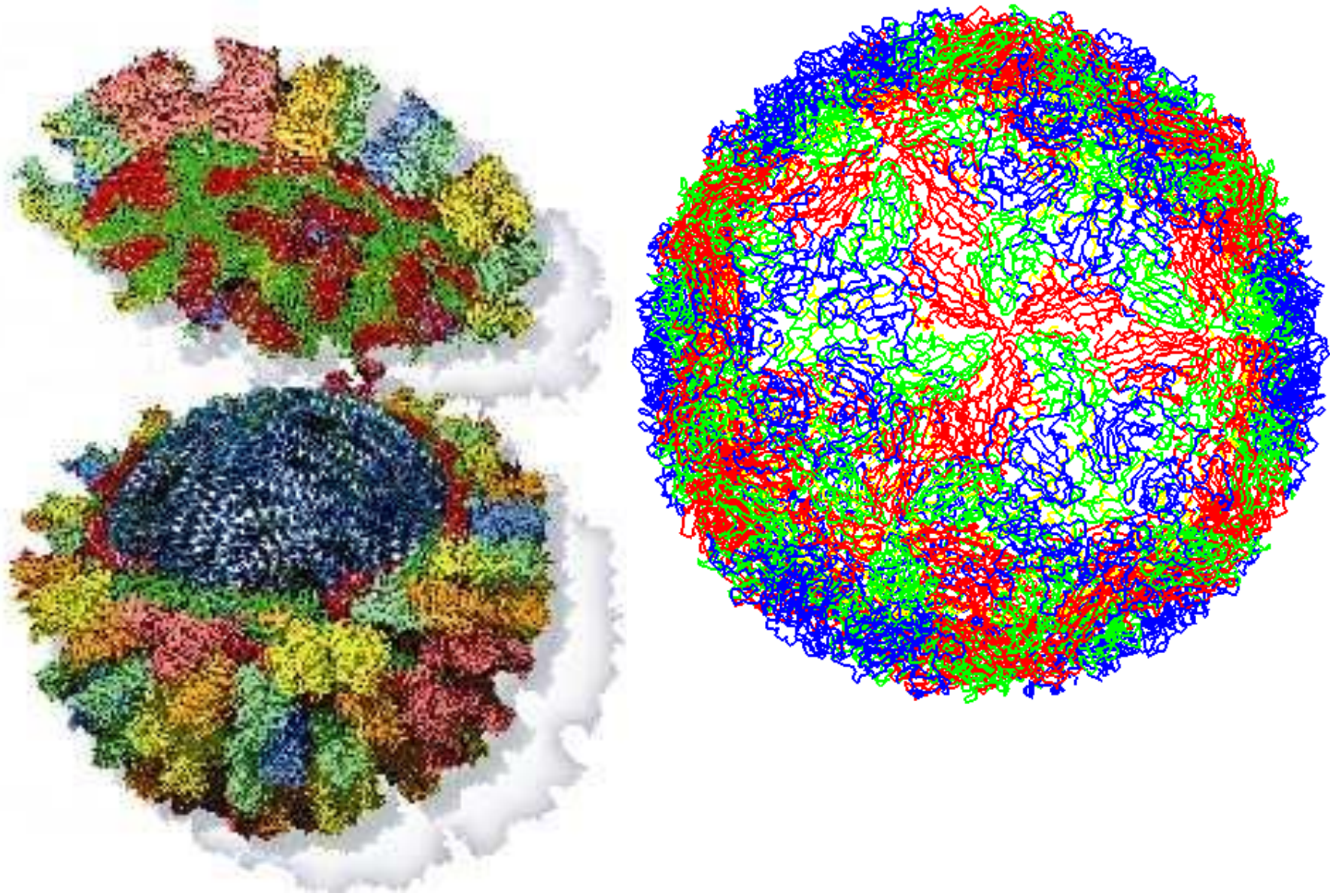


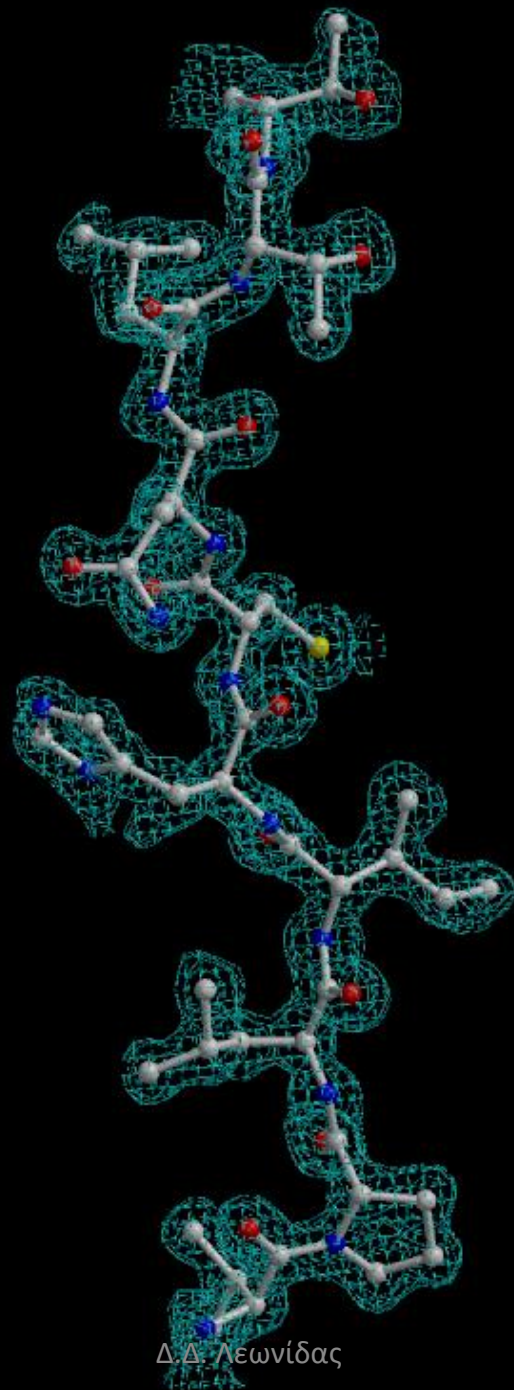
Όλα τα μόρια παρουσιάζονται σε παρόμοια κλίμακα

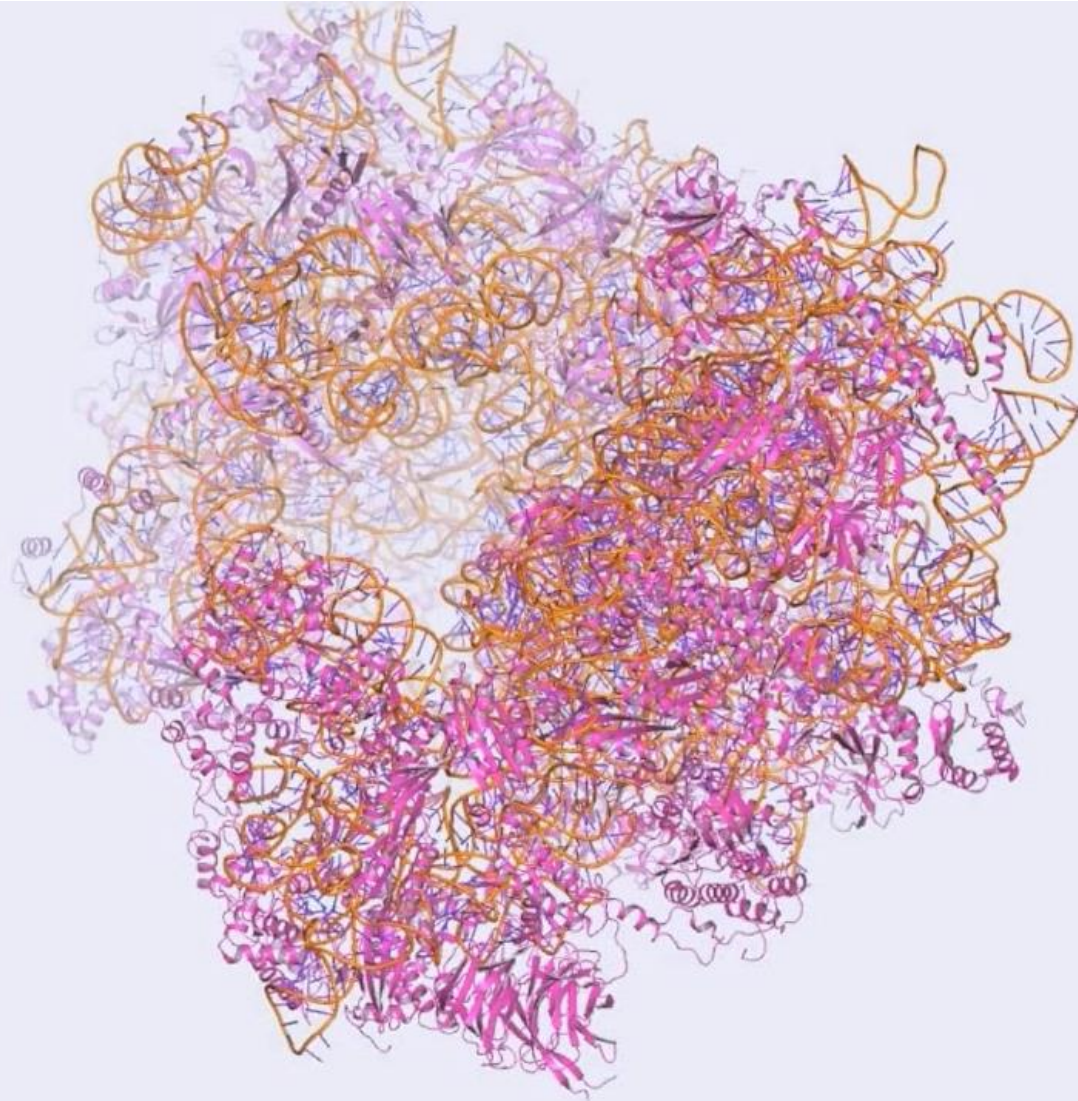
23/12/2015

Δ. Α. Λεωνίδας



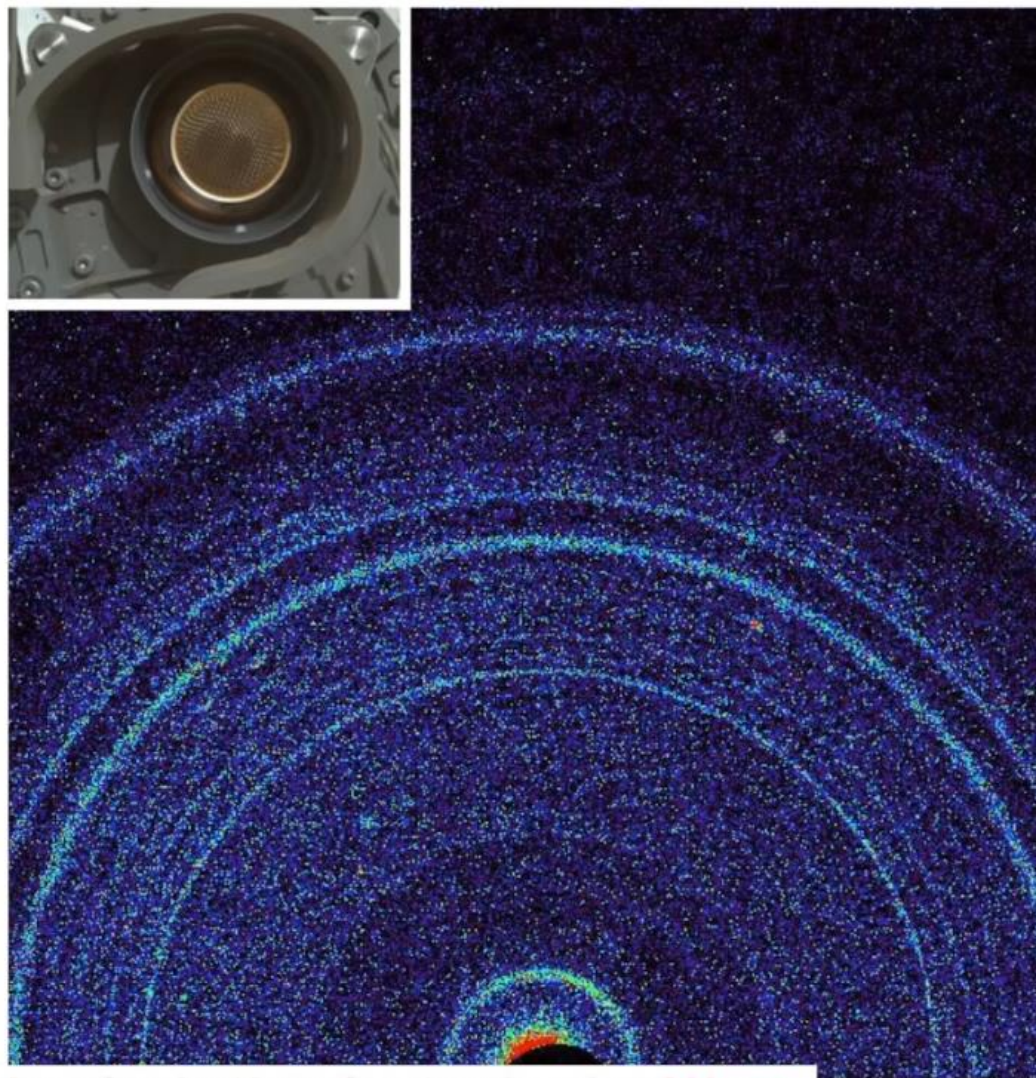
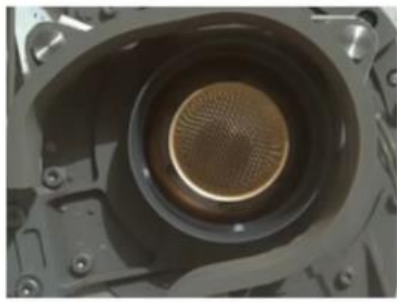






Ribosome structure: Ben-Shem et al. (2011) *Science* **334**, 1524-9

Crystallography on Mars

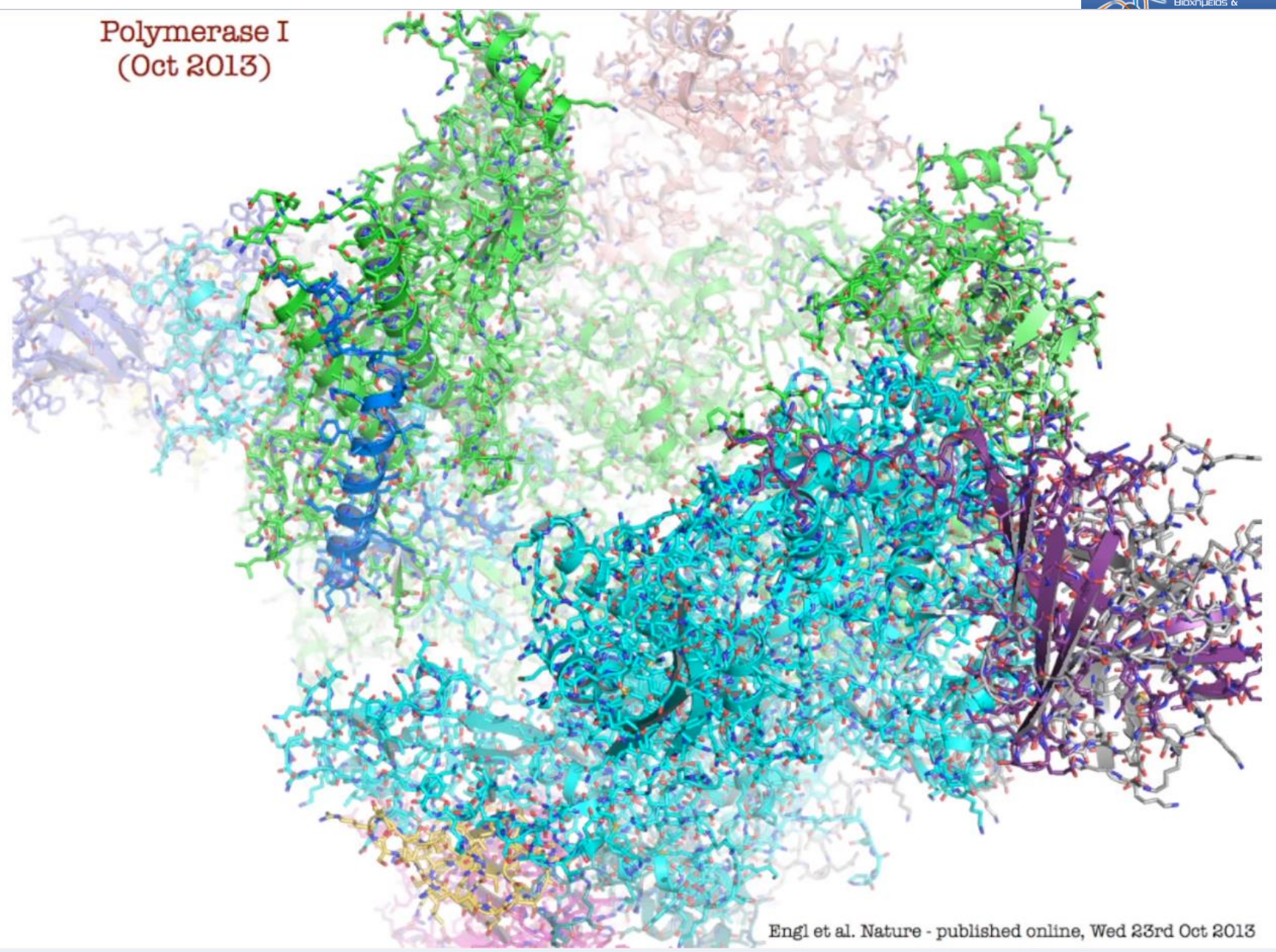


Oct. 15, 2012

the rover's **CheMin analyzer** found evidence for minerals such as **feldspar**, **pyroxenes** and **olivine**... similar to the "weathered basaltic soils" on Hawaii

Images courtesy of NASA

Polymerase I (Oct 2013)



Engl et al. Nature - published online, Wed 23rd Oct 2013

RCSB Protein Data Bank - RCSB PDB - Google Chrome
 www.pdb.org/pdb/home/home.do

Apps European Bioinf... Entrez PubMed Protein Data Ba... The Dundee

RCSB PDB PROTEIN DATA BANK

Search Everything Author Macromolecule Sequence
 e.g., PDB ID, molecule name, author

Customize This Page

Available on the App Store

ANDROID APP ON Google play

PDB-101 Hide

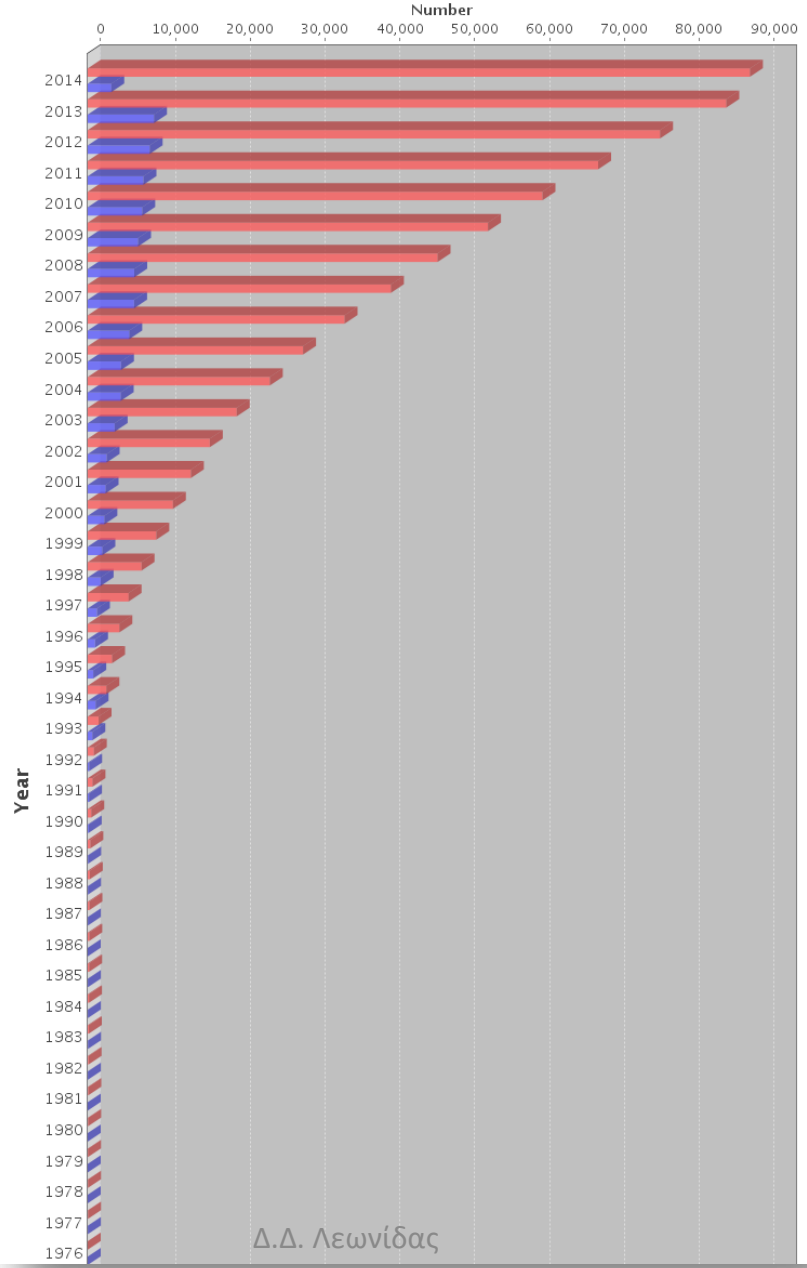
MyPDB Hide

Home Hide

Deposition Hide

Yearly Growth of Structures Solved By X-ray

number of structures can be viewed by hovering mouse over the bar



A MEMBER OF THE RCSB PDB EMDatabank
 Information Portal to Biological Macromolecular Structures
 99,928 Structures | PDB Statistics

Search

New Features Hide

Latest release: April 2014

Structure Validation Database

Website Release Archive:

RCSB PDB News Hide

Weekly | Quarterly | Yearly

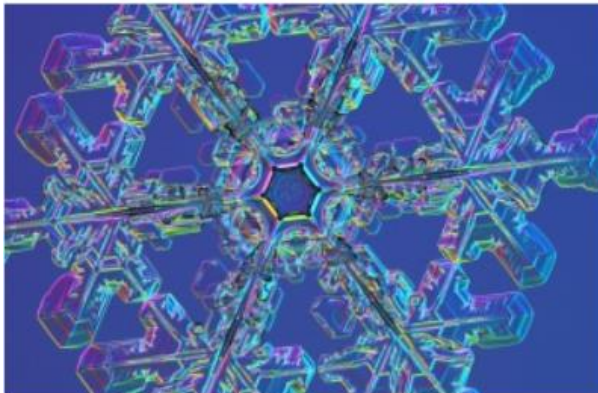
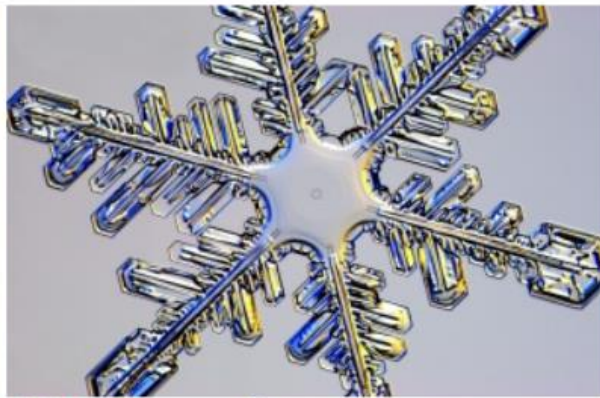
2014-05-06

Video Challenge for High School Students

Create a short video that tells a story about HIV/AIDS. Submission deadline is May 31, 2014. more

- New Website Release
- Visit the USA Science and Engineering Festival Expo on April 26 & 27
- DNA Day 2014: April 25
- Resources for High School Video Challenge

Το 1611, ο Kepler πρότεινε πως οι νιφάδες χιονιού προέρχονται από μία κανονική διευθέτηση: την ουσιαστική ιδέα ενός κρυστάλλου.



SnowCrystals.com

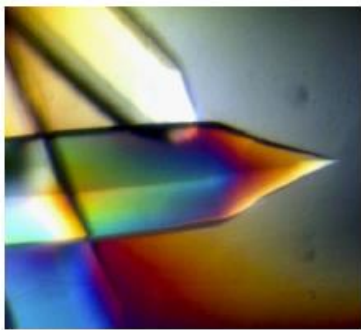
1840, Crystallisation of earthworm hemoglobin by Hünefeld

1840-1853, crystallisation of various **hemoglobin** from the blood of various invertebrates and vertebrates

Hemoglobin crystals

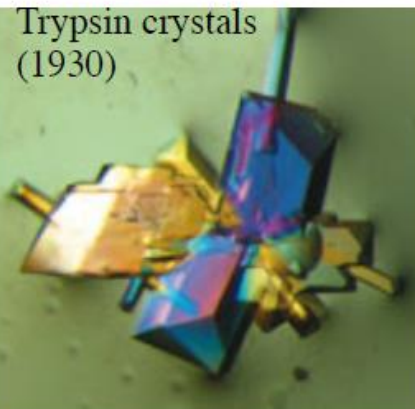


Serum albumin crystals

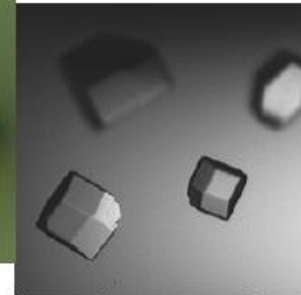


1859, Crystallisation of the reserve protein of the Brazil nut.

1898, Crystallisation of horse serum albumin



Lysozyme crystals
(1939)



1925, **Sumner** crystallised urease

1929, **Northrop** crystallised gastric enzyme pepsin

1935, **Stanley** crystallized tobacco mosaic virus and showed that it remains active even after crystallisation.

Sumner, Northrop and Stanley were awarded the Nobel prize in Chemistry in 1946

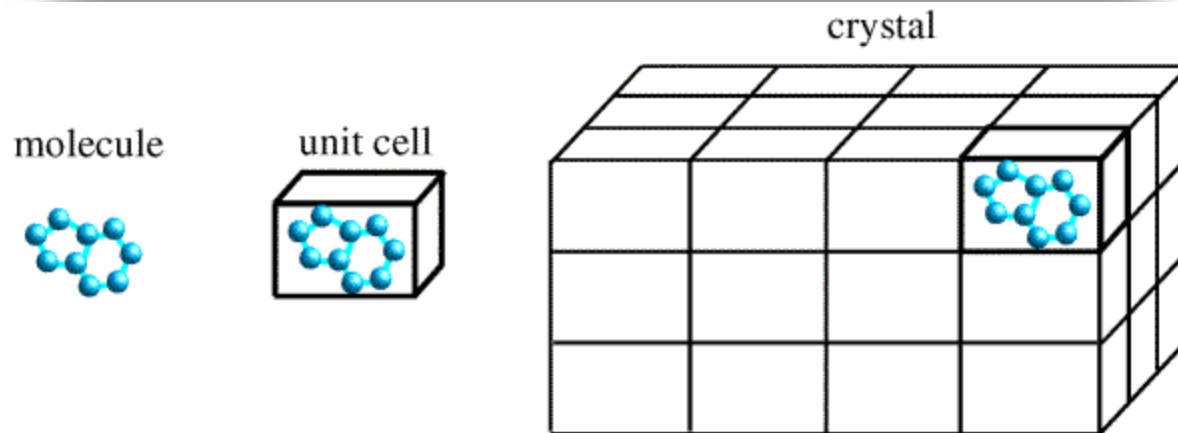
Οι κρύσταλλοι των βιολογικών μορίων είναι πιο δύσκολο να αναπτυχθούν από τους κρυστάλλους ανόργανων μορίων

Κρύσταλλοι πρωτεϊνών έναντι κρυστάλλων ορυκτών

Υψηλή περιεκτικότητα διαλύτη (30-80 %)	Χαμηλή περιεκτικότητα σε διαλύτη
Μαλακοί και εύθραυστοι	Σκληροί και ανθεκτικοί
Ευαίσθητοι σε αφυδάτωση ή αλλαγή της θερμοκρασίας, του pH ή της ιοντικής ισχύος	Ανθεκτικοί σε αφυδάτωση, αλλαγές pH, ιοντικής ισχύος
Μικροί και με χαμηλή εσωτερική ευταξία	Σημαντικό μέγεθος και υψηλή εσωτερική ευταξία
Οι συνθήκες κρυστάλλωσης είναι απρόβλεπτες	Αναπτύσσονται μέσω αλλαγών στη θερμοκρασία ή με απομάκρυνση του διαλύτη

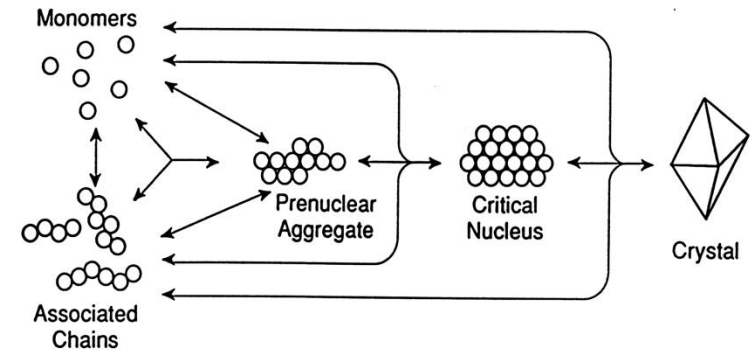
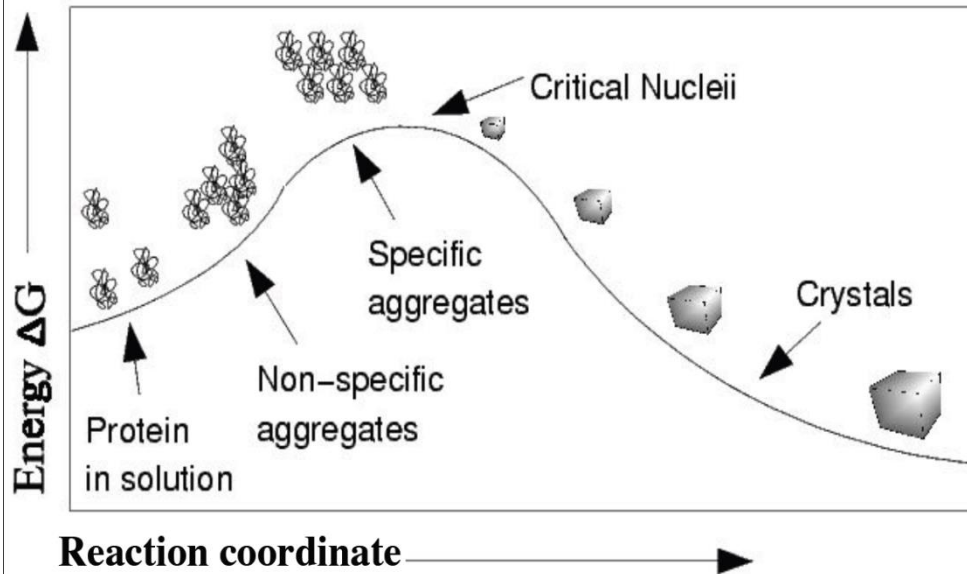
Γιατί ;

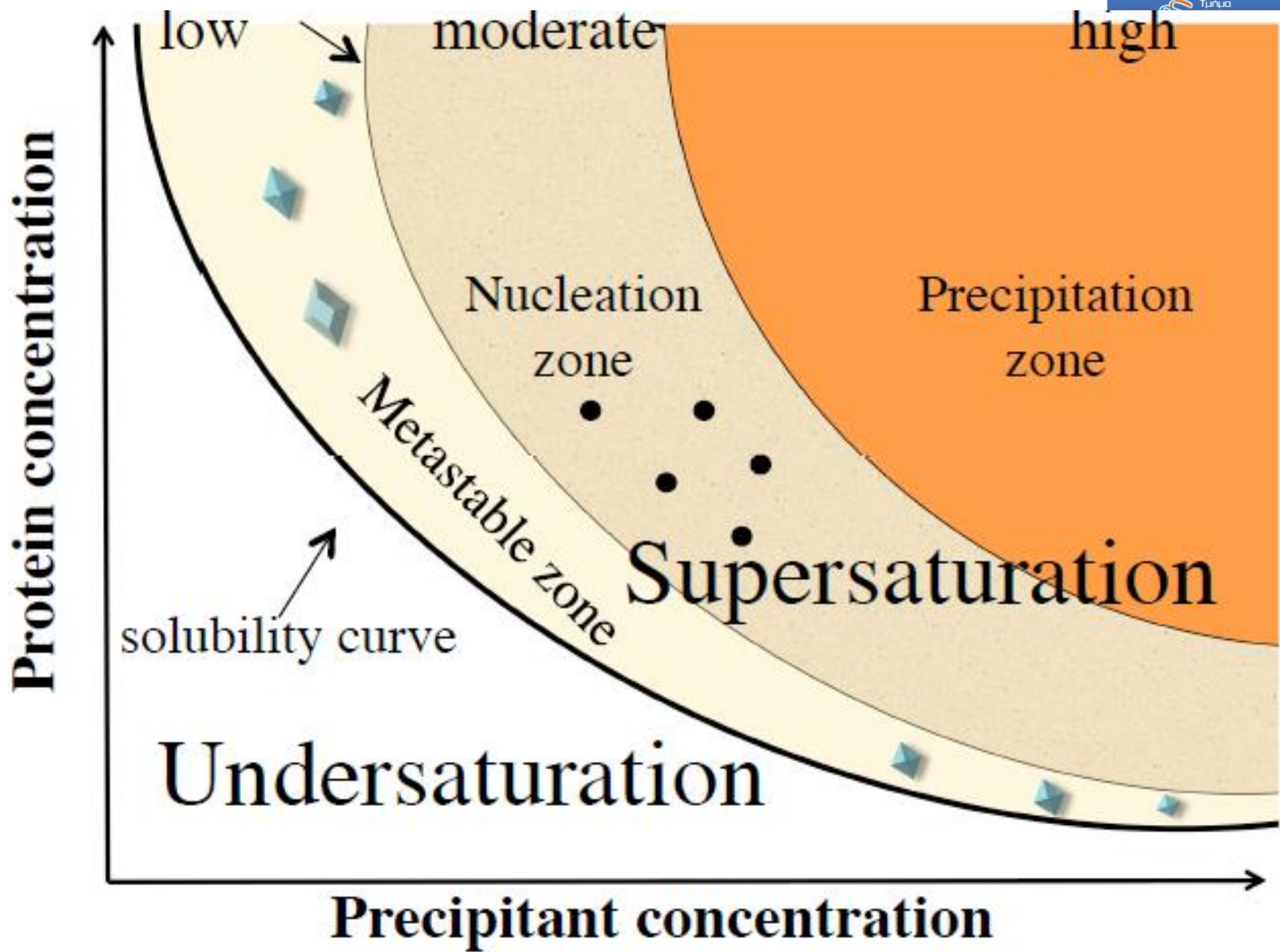
- Υψηλός βαθμός κινητικότητας στην επιφάνεια
- Χαμηλή χημική και φυσική σταθερότητα των μακρομορίων
- Απαιτήση για διαλυτή πρωτεΐνη σε υδατικά διαλύματα σε υψηλή συγκέντρωση

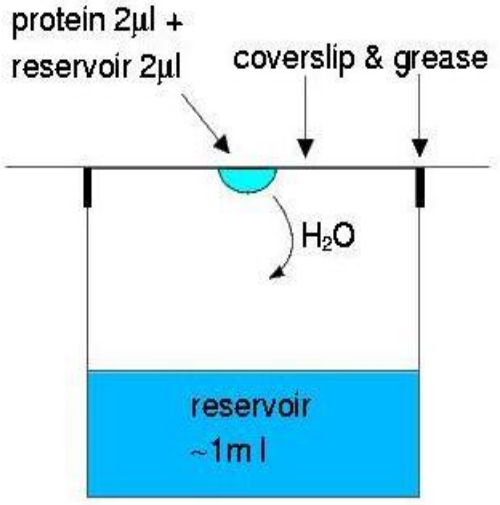


Κρυστάλλωση πρωτεϊνών: τρία κύρια στάδια

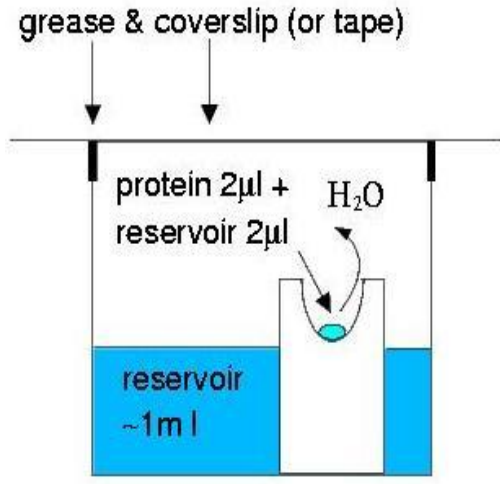
- 1. Πυρήνωση:** δημιουργία ειδικών αλληλεπιδράσεων που απαιτούνται για την ανάπτυξη κρυστάλλων
- 2. Ανάπτυξη κρυστάλλων:** διατεταγμένη εναπόθεση πρωτεϊνικών μορίων ή κανονικά διαταγμένων πρωτεϊνικών συσσωμάτων
- 3. Παύση ανάπτυξης:** το διάλυμα ανάπτυξης δεν περιέχει πλέον αρκετή ποσότητα πρωτεΐνης ή η επιφάνεια του κρυστάλλου καλύπτεται από μετουσιωμένη πρωτεΐνη ή διάφορες προσμίξεις



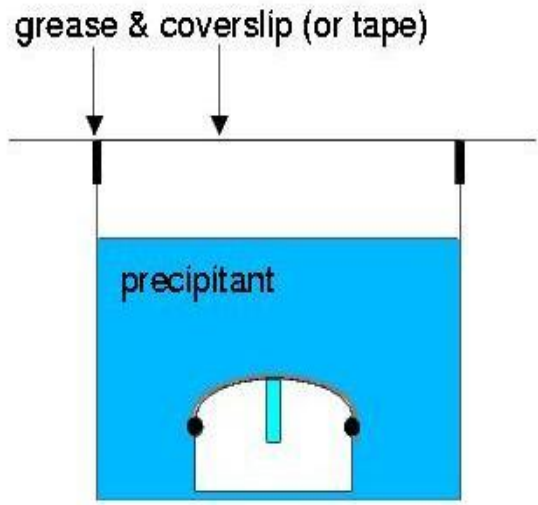




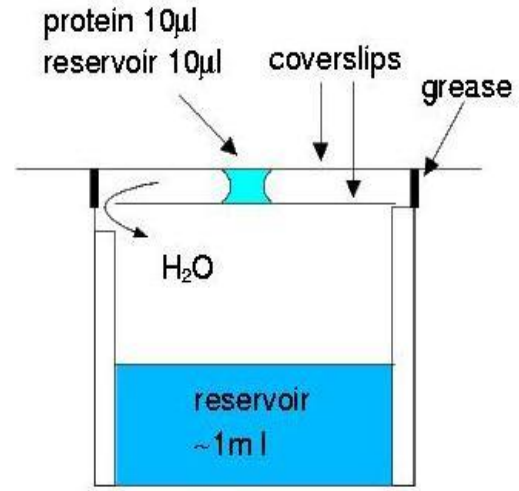
Μέθοδος κρεμάμενης σταγόνας



Μέθοδος καθήμενης σταγόνας



Μικροδιαπίδυση



Μέθοδος σταγόνας sandwich



Crystal screening



Μεταβαλλόμενες
Παράμετροι

- pH
- Ιοντική Ισχύ
- καταβυθιστικό

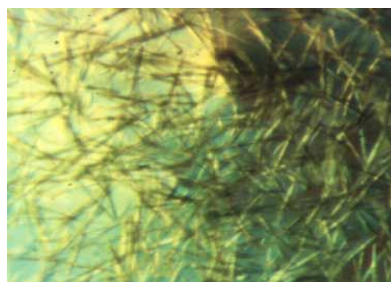
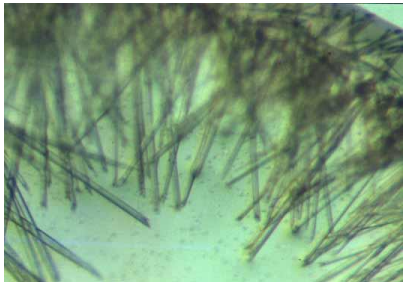
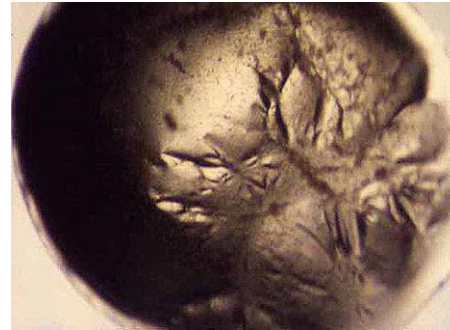
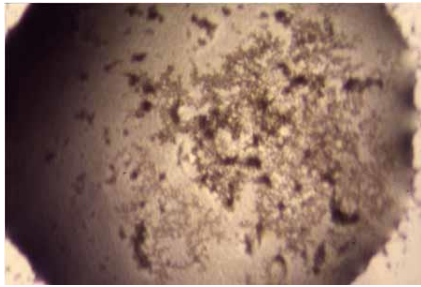
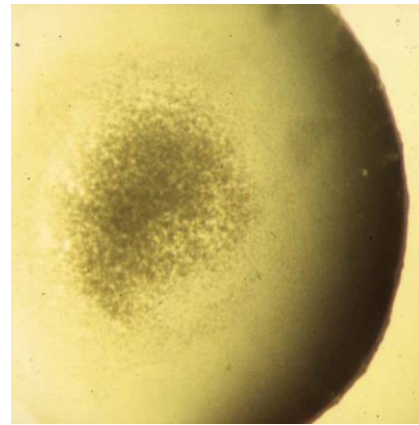
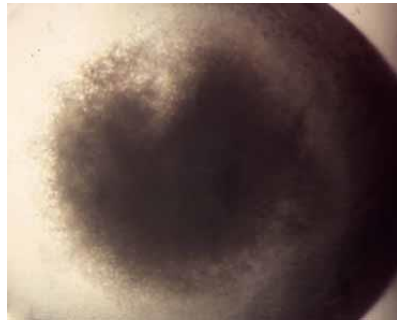
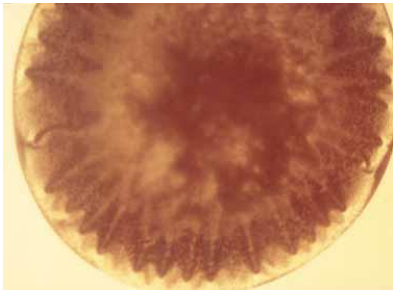
Crystal Screen™

HR2-110 Reagent Formulation

Tube #	Salt	Tube #	Buffer ◊	Tube #	Precipitant
1.	0.02 M Calcium chloride dihydrate	1.	0.1 M Sodium acetate trihydrate pH 4.6	1.	30% w/v (+)-2-Methyl-2,4-pentanediol
2.	None	2.	None	2.	0.4 M Potassium sodium tartrate tetrahydrate
3.	None	3.	None	3.	0.4 M Ammonium phosphate monobasic
4.	None	4.	0.1 M TRIS hydrochloride pH 8.5	4.	2.0 M Ammonium sulfate
5.	0.2 M Sodium citrate tribasic dihydrate	5.	0.1 M HEPES sodium pH 7.5	5.	30% w/v (+)-2-Methyl-2,4-pentanediol
6.	0.2 M Magnesium chloride hexahydrate	6.	0.1 M TRIS hydrochloride pH 8.5	6.	30% w/v Polyethylene glycol 4,000
7.	None	7.	0.1 M Sodium cacodylate trihydrate pH 6.5	7.	1.4 M Sodium citrate tribasic dihydrate
8.	0.2 M Sodium citrate tribasic dihydrate	8.	0.1 M Sodium cacodylate trihydrate pH 6.5	8.	30% w/v 2-Propanol
9.	0.2 M Ammonium acetate	9.	0.1 M Sodium citrate tribasic dihydrate pH 5.6	9.	30% w/v Polyethylene glycol 4,000
10.	0.2 M Ammonium acetate	10.	0.1 M Sodium acetate trihydrate pH 4.6	10.	30% w/v Polyethylene glycol 4,000
11.	None	11.	0.1 M Sodium citrate tribasic dihydrate pH 5.6	11.	1.0 M Ammonium phosphate monobasic
12.	0.2 M Magnesium chloride hexahydrate	12.	0.1 M HEPES sodium pH 7.5	12.	30% w/v 2-Propanol
13.	0.2 M Sodium citrate tribasic dihydrate	13.	0.1 M TRIS hydrochloride pH 8.5	13.	30% w/v Polyethylene glycol 400
14.	0.2 M Calcium chloride dihydrate	14.	0.1 M HEPES sodium pH 7.5	14.	28% w/v Polyethylene glycol 400
15.	0.2 M Ammonium sulfate	15.	0.1 M Sodium cacodylate trihydrate pH 6.5	15.	30% w/v Polyethylene glycol 8,000
16.	None	16.	0.1 M HEPES sodium pH 7.5	16.	1.5 M Lithium sulfate monohydrate
17.	0.2 M Lithium sulfate monohydrate	17.	0.1 M TRIS hydrochloride pH 8.5	17.	30% w/v Polyethylene glycol 4,000
18.	0.2 M Magnesium acetate tetrahydrate	18.	0.1 M Sodium cacodylate trihydrate pH 6.5	18.	20% w/v Polyethylene glycol 8,000
19.	0.2 M Ammonium acetate	19.	0.1 M TRIS hydrochloride pH 8.5	19.	30% w/v 2-Propanol
20.	0.2 M Ammonium sulfate	20.	0.1 M Sodium acetate trihydrate pH 4.6	20.	25% w/v Polyethylene glycol 4,000
21.	0.2 M Magnesium acetate tetrahydrate	21.	0.1 M Sodium cacodylate trihydrate pH 6.5	21.	30% w/v (+)-2-Methyl-2,4-pentanediol
22.	0.2 M Sodium acetate trihydrate	22.	0.1 M TRIS hydrochloride pH 8.5	22.	30% w/v Polyethylene glycol 4,000
23.	0.2 M Magnesium chloride hexahydrate	23.	0.1 M HEPES sodium pH 7.5	23.	30% w/v Polyethylene glycol 400
24.	0.2 M Calcium chloride dihydrate	24.	0.1 M Sodium acetate trihydrate pH 4.6	24.	20% w/v 2-Propanol
25.	None	25.	0.1 M Imidazole pH 6.5	25.	1.0 M Sodium acetate trihydrate
26.	0.2 M Ammonium acetate	26.	0.1 M Sodium citrate tribasic dihydrate pH 5.6	26.	30% w/v (+)-2-Methyl-2,4-pentanediol
27.	0.2 M Sodium citrate tribasic dihydrate	27.	0.1 M HEPES sodium pH 7.5	27.	20% w/v 2-Propanol
28.	0.2 M Sodium acetate trihydrate	28.	0.1 M Sodium cacodylate trihydrate pH 6.5	28.	30% w/v Polyethylene glycol 8,000
29.	None	29.	0.1 M HEPES sodium pH 7.5	29.	0.8 M Potassium sodium tartrate tetrahydrate
30.	0.2 M Ammonium sulfate	30.	None	30.	30% w/v Polyethylene glycol 8,000
31.	0.2 M Ammonium sulfate	31.	None	31.	30% w/v Polyethylene glycol 4,000
32.	None	32.	None	32.	2.0 M Ammonium sulfate
33.	None	33.	None	33.	4.0 M Sodium formate
34.	None	34.	0.1 M Sodium acetate trihydrate pH 4.6	34.	2.0 M Sodium formate
35.	None	35.	0.1 M HEPES sodium pH 7.5	35.	0.8 M Sodium phosphate monobasic monohydrate 0.8 M Potassium phosphate monobasic
36.	None	36.	0.1 M TRIS hydrochloride pH 8.5	36.	8% w/v Polyethylene glycol 8,000
37.	None	37.	0.1 M Sodium acetate trihydrate pH 4.6	37.	8% w/v Polyethylene glycol 4,000
38.	None	38.	0.1 M HEPES sodium pH 7.5	38.	1.4 M Sodium citrate tribasic dihydrate
39.	None	39.	0.1 M HEPES sodium pH 7.5	39.	2% w/v Polyethylene glycol 400 2.0 M Ammonium sulfate
40.	None	40.	0.1 M Sodium citrate tribasic dihydrate pH 5.6	40.	20% w/v 2-Propanol 20% w/v Polyethylene glycol 4,000
41.	None	41.	0.1 M HEPES sodium pH 7.5	41.	10% w/v 2-Propanol 20% w/v Polyethylene glycol 4,000
42.	0.05 M Potassium phosphate monobasic	42.	None	42.	20% w/v Polyethylene glycol 8,000
43.	None	43.	None	43.	30% w/v Polyethylene glycol 1,500
44.	None	44.	None	44.	0.2 M Magnesium formate dihydrate
45.	0.2 M Zinc acetate dihydrate	45.	0.1 M Sodium cacodylate trihydrate pH 6.5	45.	18% w/v Polyethylene glycol 8,000
46.	0.2 M Calcium acetate hydrate	46.	0.1 M Sodium cacodylate trihydrate pH 6.5	46.	18% w/v Polyethylene glycol 8,000
47.	None	47.	0.1 M Sodium acetate trihydrate pH 4.6	47.	2.0 M Ammonium sulfate
48.	None	48.	0.1 M TRIS hydrochloride pH 8.5	48.	2.0 M Ammonium phosphate monobasic
49.	1.0 M Lithium sulfate monohydrate	49.	None	49.	2% w/v Polyethylene glycol 8,000
50.	0.5 M Lithium sulfate monohydrate	50.	None	50.	15% w/v Polyethylene glycol 8,000

◊ Buffer pH is that of a 1.0 M stock prior to dilution with





2014 international year of crystallography

