

# **Предварительная программа V Школы-конференции молодых ученых с международным участием «Применение синхротронного излучения для решения задач биологии». Новосибирск 1 – 4 июля 2026**

Программа мероприятия будет включать лекционную и практическую части.

**Лекции будут посвящены следующим темам:**

1. Задачи структурной биологии, для решения которых наиболее эффективно использование синхротронного излучения
2. Основы рентгеноструктурного анализа биополимеров
3. Применение метода малоуглового рентгеновского рассеяния для решения задач структурной биологии
4. Пробоподготовка биополимеров перед кристаллизацией
5. Применение мягкой рентгеновской микроскопии для исследования биологических объектов
6. Томография биологических объектов с использованием синхротронного излучения
7. Основы когерентного дифракционного имиджинга
8. Текущий статус ЦКП «СКИФ» и доступные экспериментальные возможности

**Практические занятия будут посвящены следующим темам:**

## **Практическое занятие 1**

### **ПР1. In silico оптимизация генетических конструкций для гетерологичной экспрессии и кристаллизации белков**

Занятие посвящено in silico оптимизации генетических конструкций для гетерологичной экспрессии белков и их последующей кристаллизации. Участники познакомятся с применением современных вычислительных инструментов ProteinMPNN, ESMFold и FoldX для рационального дизайна мутаций, направленных на повышение растворимости и стабильности белков. В ходе практической работы будет пройден полный цикл анализа: от выявления поверхностных гидрофобных патчей до генерации, оценки и ранжирования мутантных вариантов. Все этапы будут выполняться в готовых блокнотах Google Colab, которые останутся у участников после занятия.

## **Практическое занятие 2**

### **ПР2. Решение и уточнение кристаллической структуры флуоресцентного сенсора методом РСА**

На занятии участники познакомятся с основными этапами решения кристаллической структуры белка методом рентгеноструктурного анализа. Практическая работа будет включать обработку дифракционных данных, решение фазовой проблемы методом молекулярного замещения и кристаллографическое уточнение модели. Все этапы будут разобраны на примере структуры флуоресцентного сенсора с использованием пакета CCP4. Участники смогут освоить работу с программами DIALS, AIMLESS, MOLREP, REFMAC5 и COOT.

## **Практическое занятие 3**

### **ПР3. Исследование структур биомолекул в растворе методом БиоМУРР**

Занятие посвящено первичному анализу и основным этапам обработки данных малоуглового рентгеновского рассеяния для биологических молекул в растворе. Участники будут работать с программным пакетом ATSAS, рассчитают основные структурные параметры, познакомятся с особенностями метода, требованиями к образцам и процедурой

проведения измерений. В практической части участники смогут построить трёхмерные модели пространственной формы молекулы по данным МУРР и сравнить полноатомную структуру, полученную с помощью молекулярного моделирования, с экспериментальными данными. Занятие также включает знакомство с Maestro Schrödinger и смежными инструментами VMD, HADDOCK, Desmond и Gromacs для подготовки белковых структур, белок-белкового докинга, молекулярной динамики и анализа результатов моделирования.

#### **Практическое занятие 4**

##### **ПР4. От проекций к 3D-объекту: основы обработки данных синхротронной рентгеновской томографии**

На мастер-классе участники познакомятся с базовым пайплайном обработки данных синхротронной рентгеновской томографии в задачах биологии. На практическом примере будут разобраны чтение проекций, коррекция и нормализация изображений, подбор центра вращения и реконструкция 3D-объёма. Отдельное внимание будет уделено тому, как параметры обработки влияют на качество реконструкции и дальнейшую интерпретацию биологических структур. Мастер-класс позволит понять логику перехода от исходных изображений к трёхмерной модели объекта.

#### **Практическое занятие 5**

##### **ПР5. Молекулярный докинг: оценка аффинности малых молекул к сайту связывания целевого белка**

Практическое занятие посвящено молекулярному докингу малых молекул и оценке их аффинности к сайту связывания целевого белка. Участники познакомятся со средой Maestro и разберут принципы обоснованного выбора таргетного белка. В ходе занятия будут рассмотрены настройка протоколов молекулярного докинга, проведение расчётов и анализ полученных результатов. Практикум позволит освоить базовый рабочий процесс оценки взаимодействия малых молекул с белковой мишенью.

#### **Практическое занятие 6**

##### **ПР6. Макромолекулярный докинг: анализ белок-белковых комплексов**

Практическое занятие посвящено макромолекулярному докингу, оценке энергетических параметров связывания и описанию межмолекулярных взаимодействий в белок-белковых комплексах. Участники разберут выбор таргетного белка-рецептора и белка-лиганда, определение предполагаемого места связывания и процедуру макромолекулярного докинга. Отдельное внимание будет уделено анализу результатов расчётов и интерпретации природы контактов между молекулами. Занятие позволит познакомиться с подходами к моделированию белок-белковых взаимодействий.

#### **Практическое занятие 7**

##### **ПР7. Обработка первичных данных РСА, полученных в Шанхайском центре синхротронного излучения**

Занятие посвящено обработке первичных дифракционных данных РСА, полученных в Шанхайском центре синхротронного излучения. Участники познакомятся с особенностями данных, собранных на синхротроне и упакованных в специальный архивный формат h5. В ходе практической работы будет разобрана обработка таких данных в программе XDS. Занятие поможет понять специфику подготовки первичных синхротронных данных к дальнейшему структурному анализу.

### **Практическое занятие 8**

#### **ПР8. Обработка первичных данных БиоМУРР, полученных в Шанхайском центре синхротронного излучения**

Практикум посвящён обработке первичных данных БиоМУРР, полученных в Шанхайском центре синхротронного излучения. Участники разберут процесс обработки экспериментальных данных совмещённого метода жидкостной гель-хроматографии и МУРР на примере программ ATASAS и RAW. В ходе занятия они смогут проанализировать хроматограмму с данными МУРР для многокомпонентной смеси, отделить мономерные составляющие от олигомерных и отдельно оценить их структурные характеристики. Практикум позволит познакомиться с основными этапами анализа сложных экспериментальных данных БиоМУРР.

### **Практическое занятие 9**

#### **ПР9. Сегментация 3D-структур и морфометрический анализ биологических объектов по данным HiP-CT**

На мастер-классе участники разберут подходы к сегментации 3D-структур и количественному анализу биологических объектов на основе данных синхротронной рентгеновской томографии, включая HiP-CT. Практическая часть будет посвящена работе с уже реконструированными объёмами: выделению структур интереса, построению масок, 3D-визуализации и извлечению морфометрических характеристик. Отдельно будут рассмотрены методы анализа пространственной организации тканей, включая оценку ориентации, анизотропии и архитектуры биологических структур. Мастер-класс рассчитан на участников, которые уже знакомы с основами томографической реконструкции и хотят перейти от визуализации объёмных данных к их количественному биологическому анализу.

*Также в программу Школы-конференции включён приветственный ужин, кофе-брейки, экскурсия в ЦКП "СКИФ".*