



UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DELL'AQUILA

DIPARTIMENTO DI SCIENZE FISICHE E CHIMICHE

Università degli Studi dell'Aquila
Dipartimento di Scienze Fisiche e Chimiche
Corso di Laurea in Fisica
Corso di Laurea in Scienze e Tecnologie Chimiche e dei Materiali

Seminari per studenti delle Lauree Triennali
A.A. 2015/2016

Via Vetoio, Loc. Coppito, L'Aquila
Edificio "Angelo Camillo De Meis" (Coppito 2)
Aula C1.12 (piano terra)

Mercoledì 23 Marzo 2016 h. 14.00

Dott.ssa Laura Zanetti-Polzi

*Modelli teorici per lo studio di sistemi biologici:
la dinamica molecolare classica e i metodi ibridi QM/MM*

Le simulazioni di dinamica molecolare sono uno degli strumenti più utilizzati negli studi di chimica teorica. Grazie alla dinamica molecolare (MD) è possibile studiare l'evoluzione temporale di sistemi molecolari ottenendo informazioni strutturali, dinamiche e termodinamiche. Le simulazioni MD sono applicate di frequente allo studio di sistemi di interesse biologico, come proteine ed acidi nucleici, fornendo informazioni rilevanti sulle loro fluttuazioni e cambiamenti conformazionali e contribuendo in molti casi anche ad una migliore comprensione delle loro funzioni biologiche.

I principi base della dinamica molecolare verranno molto brevemente presentati insieme a quattro esempi rappresentativi in cui vengono utilizzate tecniche completamente classiche o metodologie ibride quanto-classiche (QM/MM). Nel primo viene studiata la dinamica della migrazione del CO fotodissociato in mioglobina e la dinamica, a tale migrazione correlata, di cavità all'interno della proteina. Nel secondo viene studiata la transizione tra due strutture secondarie (α elica e β sheet) in due peptidi amiloidi: un frammento della proteina coinvolta nel Morbo di Alzheimer ed un frammento della proteina coinvolta nel Morbo di Kreutzfeld-Jacobs. Quest'ultimo peptide viene studiato nel terzo esempio con una metodologia QM/MM al fine di calcolarne lo spettro IR che, confrontato con lo spettro sperimentale, viene utilizzato per fornire informazioni sulla struttura dell'aggregato amiloide. Nell'ultimo esempio la stessa metodologia QM/MM viene applicata allo studio del potenziale redox dell'azzurina e di tre suoi mutanti, chiarendo i meccanismi atomistici alla base delle variazioni macroscopiche sperimentalmente misurate del potenziale redox