



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 della Laurea Triennale
A.A. 2017/2018

Via Vetoio, Loc. Coppito, L'Aquila
Edificio "Renato Ricamo" (Coppito 1)
Aula 1.6 (primo piano)

9/5/2018; 14.30

Dott.ssa Laura Zanetti Polzi

Università dell'Aquila

Comprendere i sistemi biologici con la chimica computazionale

Ciò che viene comunemente chiamato "vita" è un vasto insieme di complesse interazioni di un gran numero di biomolecole, come proteine, acidi nucleici, neurotrasmettitori. La comprensione dettagliata dei processi biologici a livello molecolare è un obiettivo stimolante ed ambizioso con potenziali ricadute di enorme importanza sia in campo medico che nello sviluppo di nuove tecnologie. La chimica teorica e computazionale, applicata a sistemi di interesse biologico, si basa sullo sviluppo teorico, l'implementazione e l'utilizzo di metodologie volte ad ottenere descrizioni a livello atomico-molecolare ed informazioni quantitative di tipo strutturale, funzionale, dinamico e termodinamico su processi che coinvolgono biomolecole. Gli studi teorici massimizzano il loro impatto e la loro rilevanza quando vengono condotti in stretta connessione con studi sperimentali. La capacità di un modello di riprodurre osservabili sperimentali, come ad esempio proprietà spettroscopiche, è dunque di fondamentale importanza in quanto da un lato consente di verificare la validità del modello stesso e dall'altro aiuta nell'interpretazione di misure sperimentali che con il tempo si sono fatte sempre più complesse.

Durante il seminario verranno brevemente illustrate due metodologie teorico-computazionali che trovano applicazione anche nello studio di sistemi di rilevanza biologica: le simulazioni di dinamica molecolare (MD) ed una metodologia ibrida quanto-classica. Le simulazioni MD sono uno degli strumenti più utilizzati in chimica teorica per studiare l'evoluzione temporale di sistemi complessi e 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. Le metodologie ibride quanto-classiche si basano sulla trattazione quantistica di una parte del sistema e classica del resto del sistema, e vengono utilizzate per descrivere processi che necessitano una descrizione quantistica in sistemi complessi. Tali metodologie verranno presentate insieme ad alcuni esempi di applicazione.