



Università degli Studi di Perugia
Dipartimento di Fisica
DOTTORATO DI RICERCA
in “Fisica e Tecnologie Fisiche”
A. A. 2011-2012

AVVISO DI SEMINARIO / LEZIONE PER IL DOTTORATO

Docente: Dr. Alessandro Paciaroni

“Dinamica di biomolecole .”

Abstract: Schroedinger definiva le proteine “cristalli aperiodici”, ossia sistemi non periodici come i cristalli, ma “ordinati” perché caratterizzate da una struttura unica adatta a svolgere una funzione specifica. In questo seminario sarà presentato il ruolo chiave della dinamica nello svolgimento della funzionalità biologica delle proteine. Esempio chiave è l'**emoglobina**, con la complessità conformazionale e l'effetto cooperativo ad esso dovuto per cui le molecole O₂ si legano in successione non casuale ai quattro siti disponibili. Dopo aver introdotto il concetto di frustrazione si definiscono lo **stato** ed i **sottostati conformazionali** (CS) di una proteina. Il teorema fluttuazione-dissipazione lega le fluttuazioni all'equilibrio con le transizioni di non-equilibrio, e consente di interpretare gli esperimenti di **flash photolysis**, che forniscono la più importante evidenza per l'esistenza dei CS. Si presenta il layout di un esperimento di flash photolysis. I primi esperimenti di flash photolysis su biomolecole sono stati effettuati sulla **mioglobina**, la cui struttura è descritta in dettaglio. Il rebinding è di solito descritto da una legge di tipo Arrhenius. I risultati ottenuti per la **survival probability** $N(t)$ a bassa temperatura sono non-esponenziali. Questa non-esponenzialità è spiegabile con l'esistenza di minimi quasi equivalenti dell'ipersuperficie dell'energia potenziale, ossia i CS, per cui esiste una distribuzione di barriere diverse tra i minimi. Sulla base di questi risultati si discute dell'organizzazione dell'**energy landscape** (taxonomic, statistical e few-level CS), con il legame con i diversi tempi caratteristici della dinamica. L'evidenza dei taxonomic CS è data da studi dello stretching CO della mioglobina, che si divide in tre diverse bande corrispondenti a sottostati con popolazioni dipendenti da parametri esterni come temperatura, pH, pressione e tipo di solvente. Questi CS tassonomici hanno anche funzionalità diverse. Lo studio dello stretching CO risolto nel tempo consente di studiare i CS statistici alla base dei CS tassonomici. I CS statistici possono essere studiati anche mediante **scattering di neutroni**. Un esperimento classico di scattering di neutroni in cui i CS statistici sono rivelati è presentato.

Referenze: Austin RH et al, Dynamics of Ligand Binding to Myoglobin, *Biochemistry* **14**, 5355 (1975).

IL COORDINATORE

Prof. Maurizio Busso

N.B.: la partecipazione a lezioni, corsi e seminari del Dottorato è obbligatoria per gli studenti iscritti al primo anno; è comunque vivamente raccomandata anche per i dottorandi degli altri Cicli. [In diversi casi l'invito può essere esteso pure agli studenti del corso di Laurea Magistrale in Fisica, se disponibili ed interessati.]