

Programma svolto di Fisica Biologica 2

A.A. 2014-2015

S. Morante, V. Minicozzi, F. Stellato

- ✓ Funzioni di Stato. L'energia libera di Gibbs e la spontaneità di una reazione. Soluzioni ideali e soluzioni reali: attività e potenziale chimico.
- ✓ L'acqua e il legame idrogeno. Entalpia di formazione. Il modello di Kauzmann: contributo cratico e contributo unitario.
- ✓ Struttura Terziaria. L'esperimento di Anfinsen. Il modello meccanico.
- ✓ Interazione radiazione-materia. Richiami sulle proprietà delle onde. Introduzione alla spettroscopia. Posizione, intensità ed ampiezza delle bande spettrali.
- ✓ Spettroscopia XAS- teoria: Legge di Lambert-Beer. Sezione d'urto microscopica e macroscopica. Regola d'oro di Fermi. Derivazione euristica dell'equazione EXAFS. Approssimazioni di singolo e multiplo scattering. Descrizione dell'equazione EXAFS.
- ✓ Spettroscopia XAS- apparato sperimentale: Generazione della radiazione X: bending magnets, wigglers e ondulatori. Specchi a raggi X e monocromatori. Detector a gas ed a stato solido.
- ✓ Spettroscopia XAS – raccolta dati: Riduzione e analisi dati. Regioni XANES ed EXAFS. Determinazione dell'energia di soglia. Normalizzazione di uno spettro. Estrazione della $\chi(k)$. Modellizzazione di un sistema biologico e diagramma di flusso di un fit EXAFS. Multiplo scattering nell'istidina.
- ✓ Ruolo Fisiologico e Patologico dei Metalli. Folding vs Misfolding.
- ✓ Cosa sono i Protein Conformational Diseases (PCD).
- ✓ Spettroscopia XAS – applicazioni: Peptide Abeta in interazione con Cu(II) e Zn(II). Cenni sulle simulazioni CPMD dell'Abeta coordinato allo Zn(II).
- ✓ Spettroscopia XAS - applicazioni: Proteina Prionica in interazione con Cu(II). Interazione di PrP con Cu(II) e Zn(II). Simulazioni CPMD Cu(II)-HGGGW
- ✓ Le interazioni che determinano il folding: il modello meccanico. Stretching, Bending.
- ✓ Approssimazione di geometria rigida. Il potenziale torsionale. I grafici di Ramachandran
- ✓ Interazioni non bonded. Il potenziale alla Lennard-Jones. Termine attrattivo: interazione dipolo indotto-dipolo indotto. Termine repulsivo. Il potenziale coulombiano: l'espansione in multipoli.
- ✓ Minimo dell'energia conformazionale: il simulated annealing.
- ✓ Struttura Quaternaria. Il modello MWC: il caso dell'emoglobina.
- ✓ I Sistemi complessi e il concetto di conoscenza in biologia
- ✓ Il sistema immunitario: cellule B e cellule T. Anticorpi e molecole MHC. La mimesi molecolare.
- ✓ Un algoritmo per selezionare peptidi "simili".
- ✓ Il teorema di Bayes: costruzione dell'indicatore biologico
- ✓ Il modello di Eigen. Evoluzione: condizioni necessarie per l'insorgenza di un comportamento darwiniano.
- ✓ Modellizzazione di un sistema darwiniano.
- ✓ Definizione di iperciclo e iperciclo astratto.
- ✓ Analisi di punto fisso di una cinetica chimica. Ipercicli e catene catalitiche.