



## Scuola Superiore di Catania

*Corso Specialistico*

a.a. 2024-2025

### **Studi chimici, fisici e computazionali su biomolecole**

*Chemical, physical and computational studies on biomolecules*

Lingua/e dell'insegnamento:

Inglese

Prerequisiti richiesti:

Conoscenze di base di chimica e fisica

Obiettivi formativi:

Ottenere le conoscenze basilari sui processi fisico-chimici che permettono la regolazione, struttura e dinamica delle macromolecole biologiche. Inquadrare la fenomenologia delle biomolecole come risultato di meccanismi conformazionali, meccanici ed elettrostatici regolati dalle leggi della fisica statistica. Acquisire i concetti di base ed applicativi di dicroismo circolare e spettrometria di massa per lo studio di biomolecole e reazioni chimiche tra biomolecole.

Contenuti delle lezioni:

Ripasso di concetti fondamentali in fisica statistica e introduzione alle biomolecole. Forze di Van der Waals: origine (Keesom, Debye, London), universalità e propagazione a grandi scale. Potenziale di Lennard-Jones. Elettroliti: equazioni di Poisson-Boltzmann e Debye-Hückel. Legge di Gouy-Chapman, equazione di Grahame. Condensazione di Manning. Teoria DLVO. Introduzione alla fisica dei polimeri: definizioni, effetto del solvente, rigidità, risposta a una forza esterna. Diffusione e trasporto: Equazione di diffusione ed equazione di Langevin. Effetti idrodinamici e diffusione di polimeri. Concetti di base di spettrometria di massa. Principi fisici e strumentazioni. Metodi non convenzionali. Reazioni in fase gassosa. Introduzione alla bioinformatica - Tipologie di dati. - Algoritmi per l'analisi di dati NGS. - Pipeline computazionali. - Galaxy e snake-make. Analisi di network biologiche - Pathway, network e tool di analisi e di annotazione funzionale - Introduzione a Cytoscape. Panoramica sui plug-in principali. Introduzione al Dicroismo Circolare: Chiralità intrinseca ed indotta - Teoria della tecnica spettroscopica del Dicroismo circolare. - Composti chirali: enantiomeri, caratteristiche strutturali. Chiralità puntuale vs Chiralità Supramolecolare. - Le biomolecole e il Dicroismo Circolare: relazioni tra strutture (primarie, secondarie, terziarie) e segnali spettroscopici. - Dicroismo Circolare indotto: teoria e applicazioni. Probes conformazionali: caratteristiche e applicazioni - Come scegliere il ligando ideale: le porfirine molecole dalle



---

molteplici caratteristiche. - Sensori per conformazioni inusuali del DNA: Z-DNA e G-Quadruplex. - Modulatore conformazionale del Proteasoma.

Metodologia didattica:

Lezioni frontali ed esercitazioni

Modalità della verifica finale di apprendimento:

Test scritto