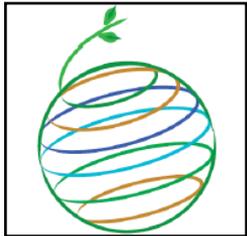


*Proff. Ugo Cosentino, Claudio Greco*

# **Temi di ricerca per progetti di tirocinio/tesi**

*Dipartimento di Scienze dell'Ambiente e della Terra  
Università degli Studi di Milano-Bicocca*



# Modellizzazione di processi a livello molecolare

## Metodologie computazionali

### ❑ Modelli classici MM/DM

(Meccanica Molecolare e Dinamica Molecolare)

Processi che non comportano significativi riarrangiamenti della distribuzione elettronica (es.: riconoscimento molecolare)

### ❑ Modelli quantomeccanici QM

Processi che coinvolgono significativi riarrangiamenti della distribuzione elettronica (es.: reattività, spettroscopia)

### ❑ Modelli ibridi MM-QM

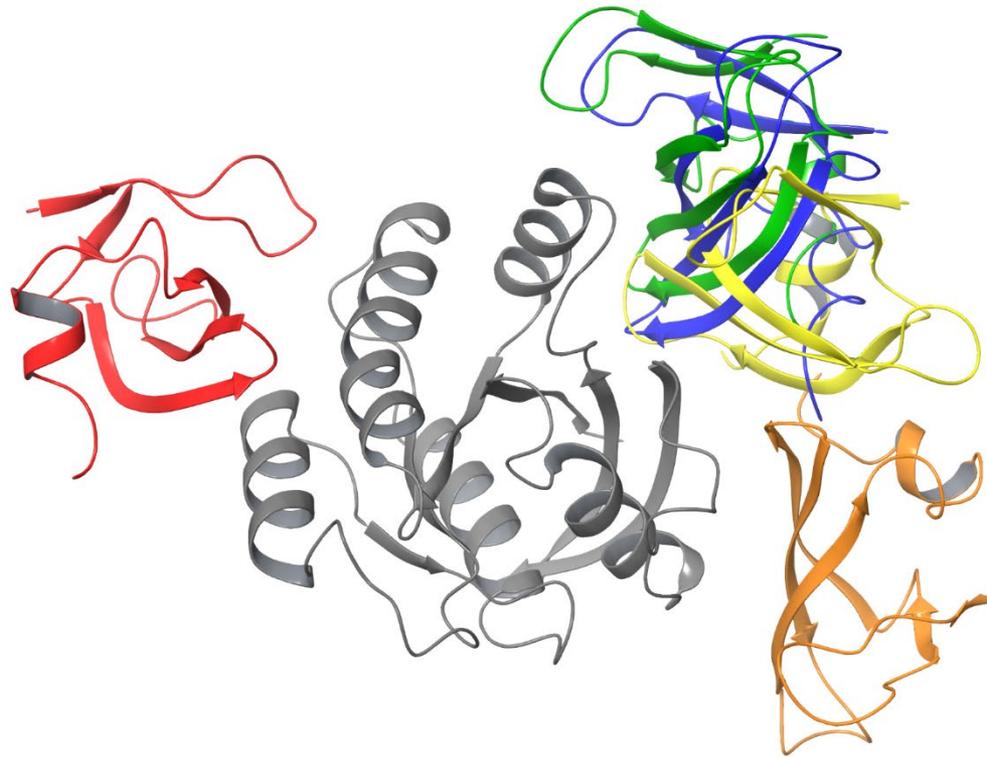
Modelli differenti utilizzati per descrivere porzioni differenti del sistema:

QM per la «parte» reattiva

MM per «l'ambiente» circostante

# Riconoscimento molecolare proteina-proteina

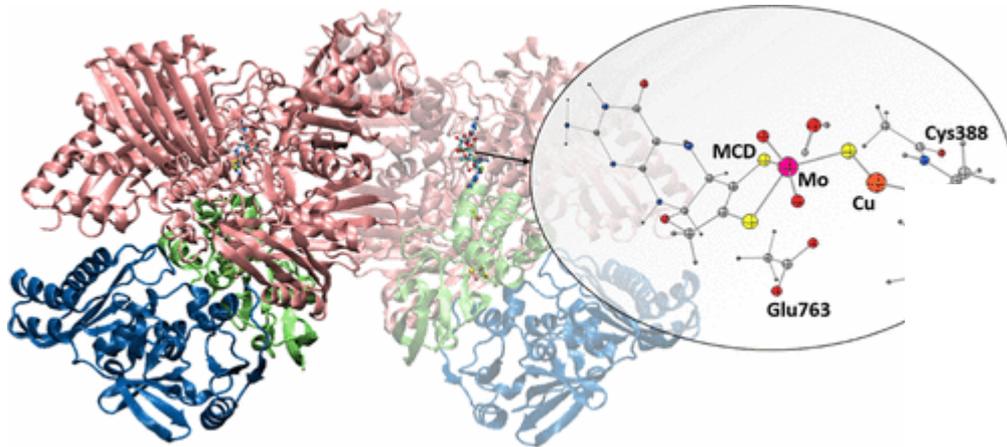
Studio dell'interazione di affitine con partner proteici



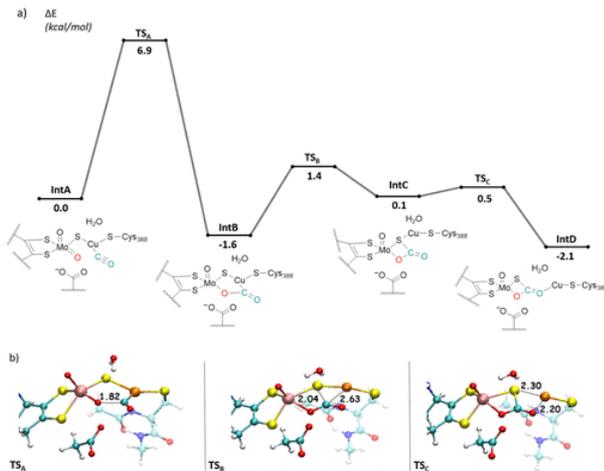
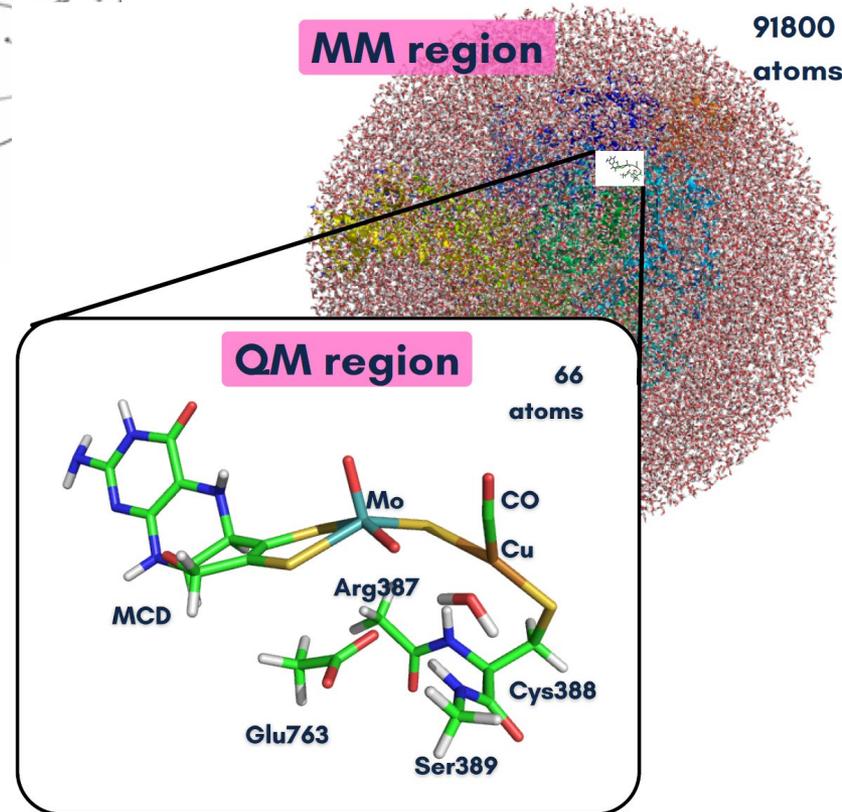
- ❑ Docking molecolare e refinement delle pose ottenute **MM/DM**
- ❑ Mutazione della sequenza aminoacidica dell'affitina per ottimizzazione dell'interazione affitina-partner **MM/DM**

# Studio teorico reattività enzimatica

## Ossidazione biologica di CO da enzima contenente Mo/Cu



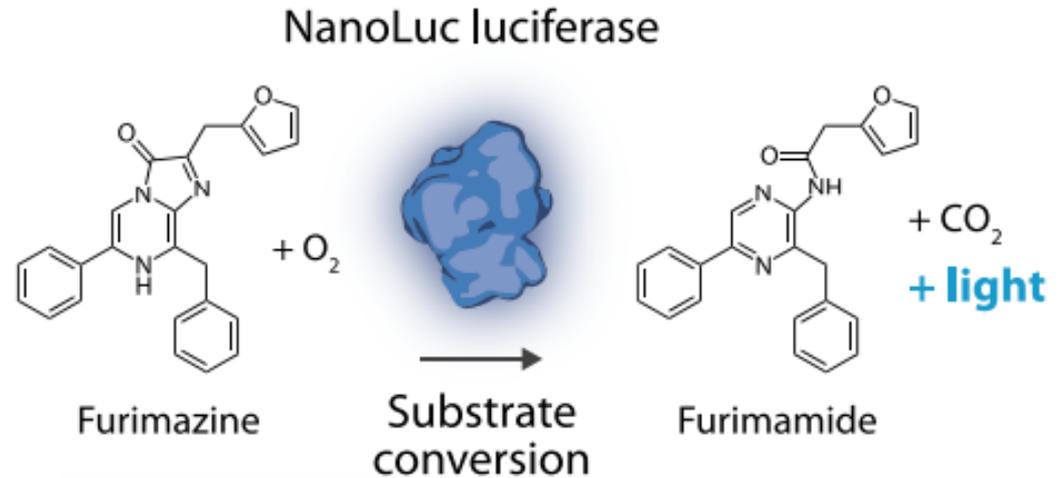
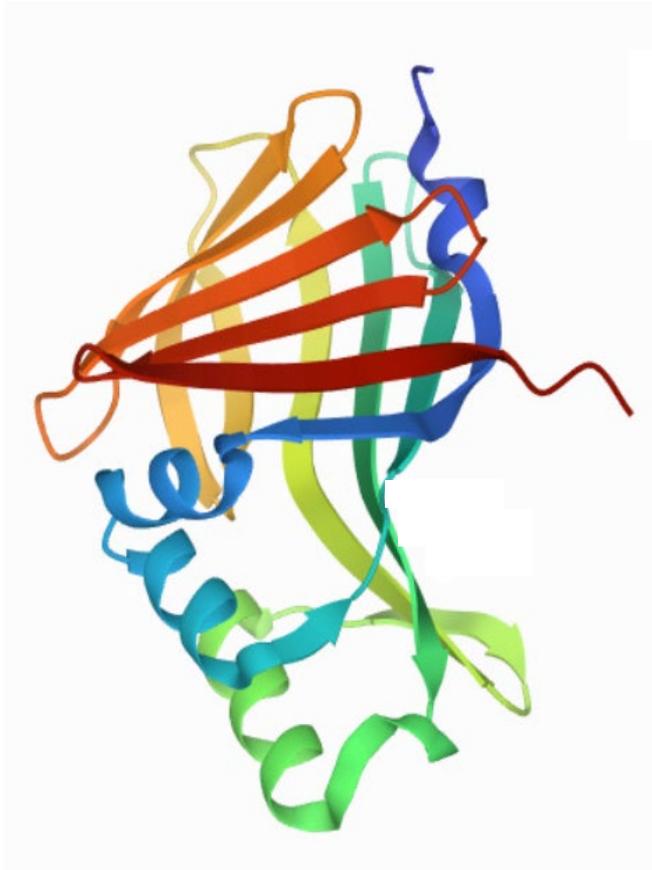
**MM region** 91800 atoms



- Studio del meccanismo di reazione **QM – QM/MM**

# Studio teorico reattività enzimatica e spettroscopia

## Luciferasi e bioluminescenza

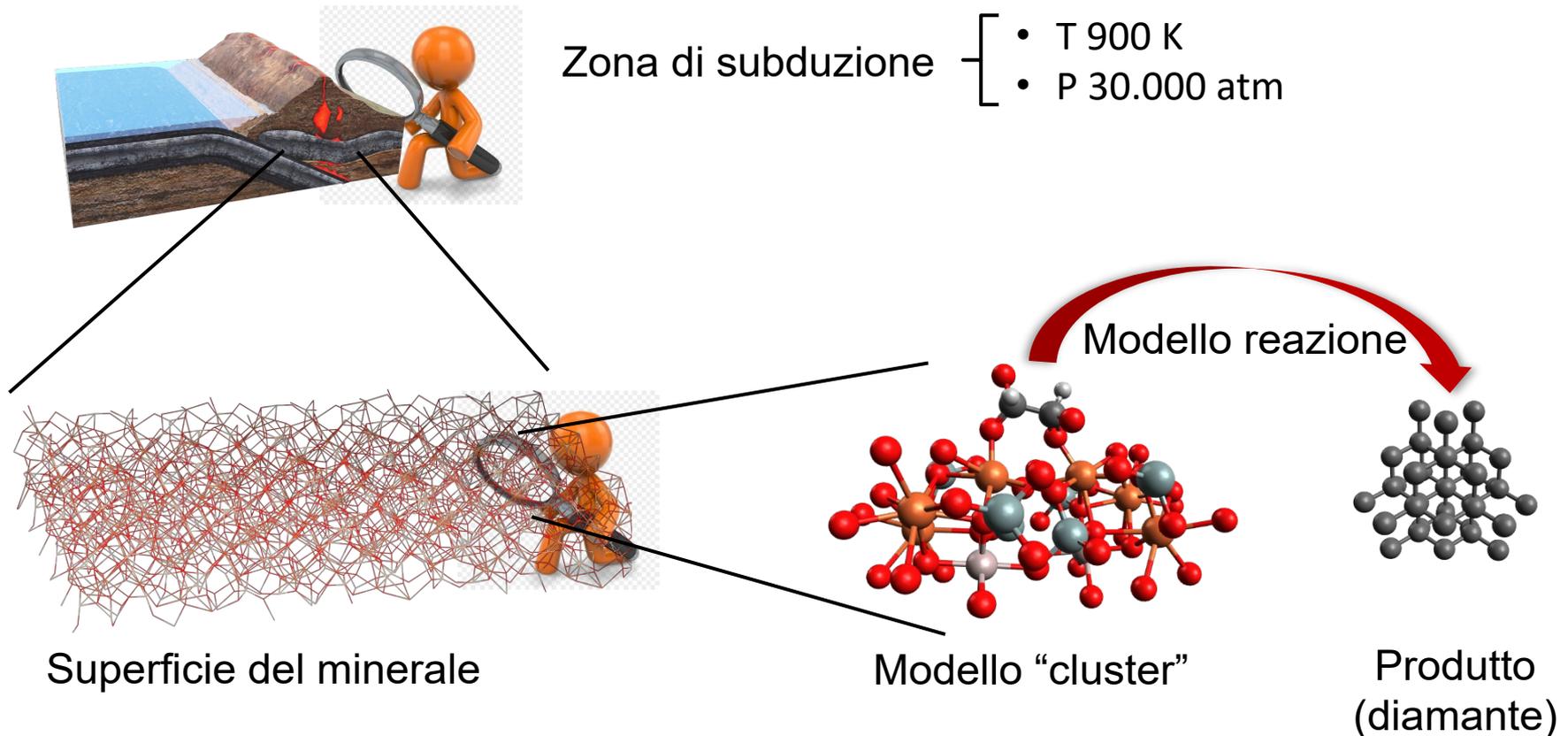


Enzimi che catalizzano una redox  
accompagnata da emissione di  $h\nu$

- Individuazione del sito catalitico mediante docking molecolare **MM/DM**
- Studio delle proprietà spettroscopiche del prodotto **QM – QM/MM**
- Studio del meccanismo di reazione **QM – QM/MM**

# Studio teorico reattività geochimica

## Formazione di microdiamanti da acidi organici nelle zone di subduzione



- Costruzione modello «cluster» e acqua a T e P elevate **MM/DM**
- Studio del meccanismo di reazione redox **QM – QM/MM**

**FINE PRESENTAZIONE**