

Proprietà dinamiche di proteine e soft matter

Fisica applicata a beni culturali

Antonio Cupane

Grazia Cottone

Matteo Levantino

Margarita Fomina

Irina Piazza

Loreto Misuraca

Vincenzo De Michele

Liliana Barbieri

PRINCIPALI TECNICHE SPERIMENTALI

- Scattering di raggi X
- Scattering di neutroni
- Spettroscopia dielettrica
- Spettroscopia infrarossa
- Calorimetria
- Simulazioni di Dinamica Molecolare
- Assorbimento ottico, fluorescenza

ESRF: European Synchrotron



Raggi X:

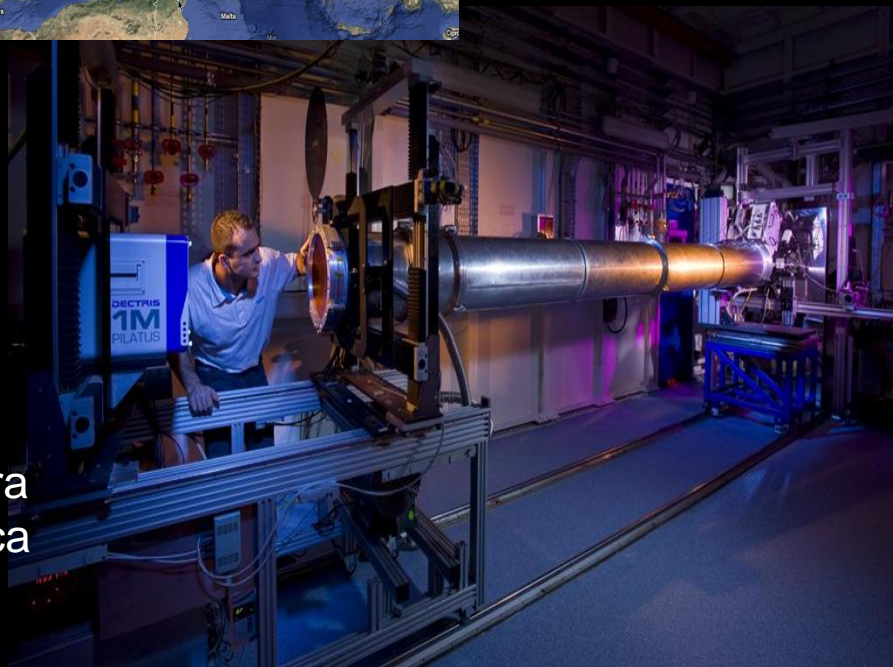
- intensi
- brevi (~100 ps)

Scattering di raggi X:

- SAXS
- WAXS

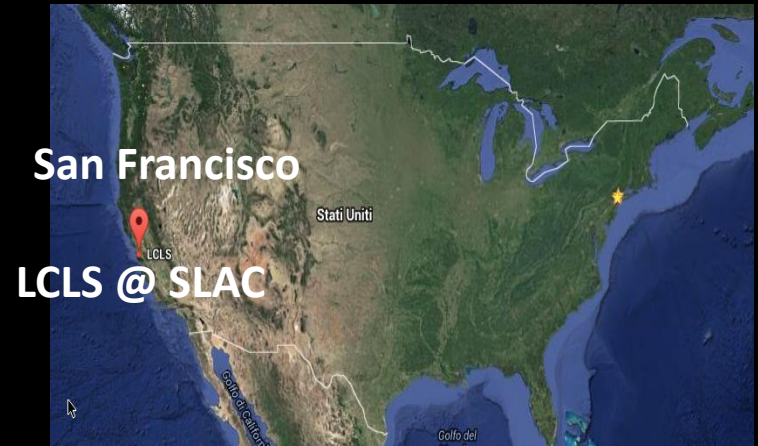
Impulsi di raggi X prodotti dal sincrotrone vengono usati per monitorare i **moti intramolecolari delle biomolecole**

È possibile indagare il cambiamento di struttura di una proteina indotto da una reazione chimica

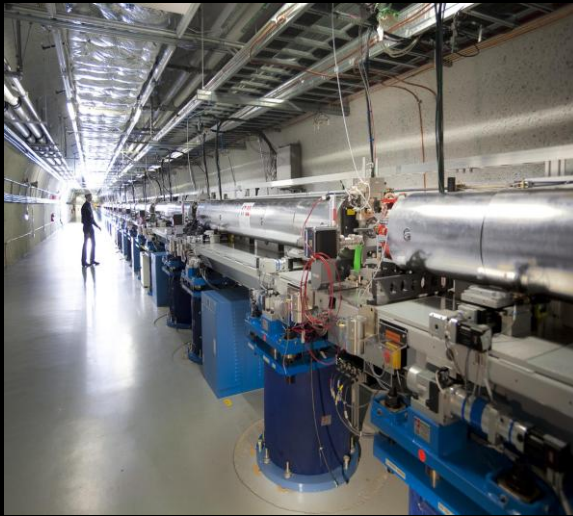




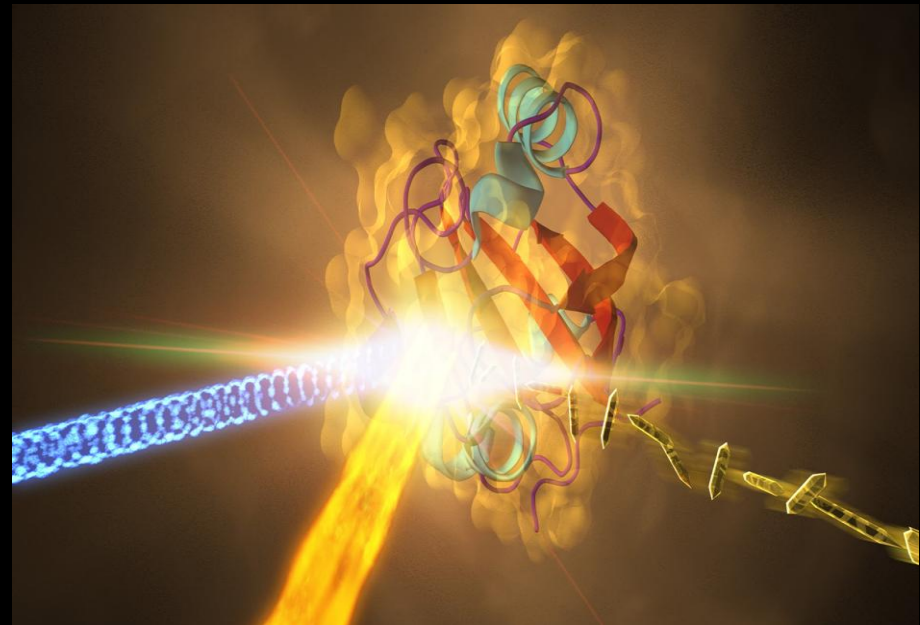
Linear Coherent Light Source



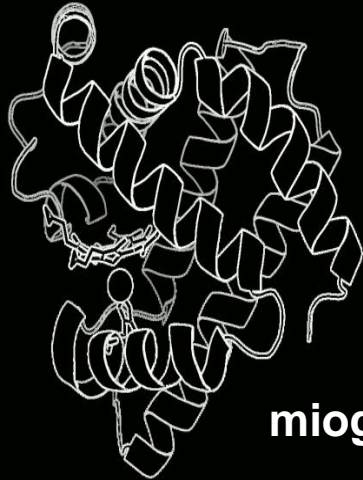
Dinamica di biomolecole tramite un laser di raggi X



**risoluzione temporale ~10 fs
→ “molecular movies”**



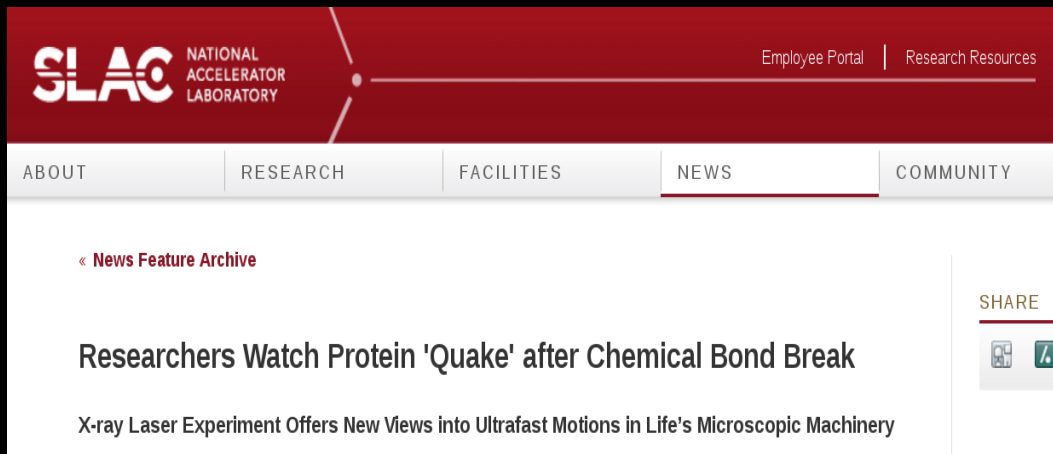
Dinamica ultraveloce di una proteina



mioglobina



A screenshot of a Nature Communications article page. The page features the journal's logo at the top, navigation links (Home, About the journal, Authors and referees, Browse archive, Search), and a breadcrumb trail: nature.com > journal home > archive by date > april > full text. The article title is "Ultrafast myoglobin structural dynamics observed with an X-ray free-electron laser". The authors listed are Matteo Levantino, Giorgio Schirò, Henrik Till Lemke, Grazia Cottone, James Michael Gnowina, Diling Zhu, Mathieu Chollet, Hyotcherl Ihee, Antonio Cupane & Marco Cammarata. On the right side, there is a 3D molecular model of myoglobin with a red focus of protein quake and a green arrow indicating a structural change.



A screenshot of a news article from SLAC National Accelerator Laboratory. The header includes the SLAC logo and navigation links for Employee Portal and Research Resources. The main navigation bar has tabs for ABOUT, RESEARCH, FACILITIES, NEWS, and COMMUNITY. The article title is "Researchers Watch Protein 'Quake' after Chemical Bond Break". Below the title, it says "X-ray Laser Experiment Offers New Views into Ultrafast Motions in Life's Microscopic Machinery". There is a "SHARE" button with social media icons.

- **Espansione della proteina in ~100 fs**
- **Oscillazioni smorzate della proteina nella scala dei ps**

Studio acqua confinata

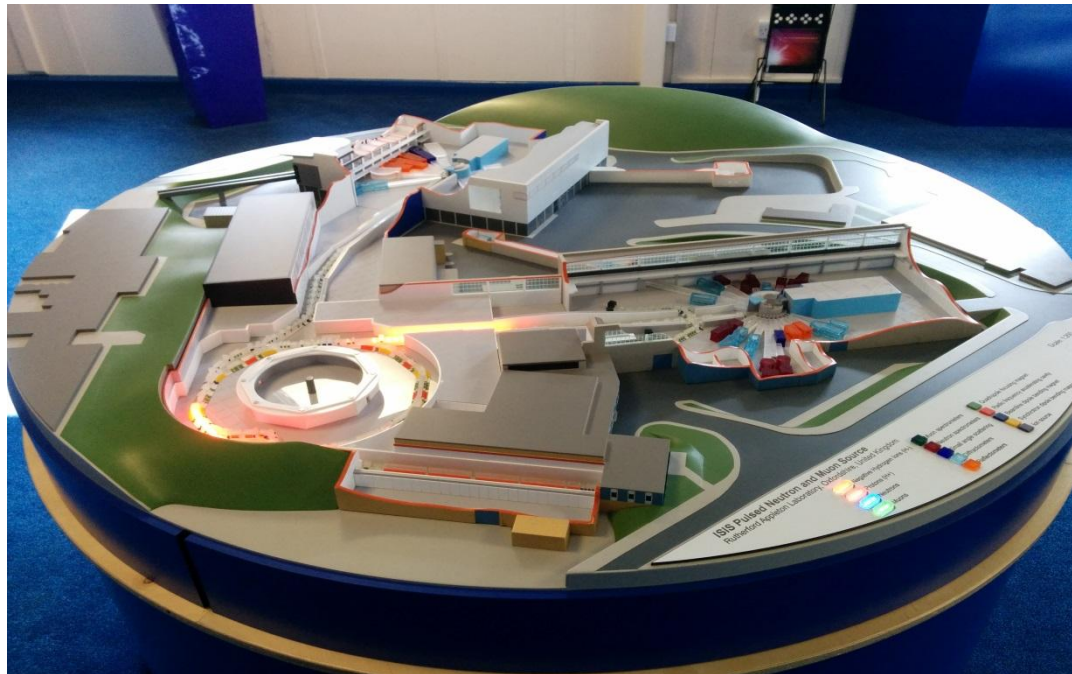
- Caratterizzazione della dinamica dell'acqua confinata in matrici di silice;



- la matrice di silice simula bene il confinamento dell'acqua in sistemi biologici.

La tecnica DINS

- Energia fascio dei neutroni incidenti sul target da parte dello spettrometro VESUVIO : $10^{-3} - 10^4$ eV;
ISIS - Rutherford Appleton Laboratories Oxford UK



- La tecnica DINS ci fornisce informazioni sulla:
 - distribuzione dei momenti dei nuclei del sistema;
 - energia cinetica media di singola particella degli idrogeni del sistema.

Fisica applicata ai beni culturali



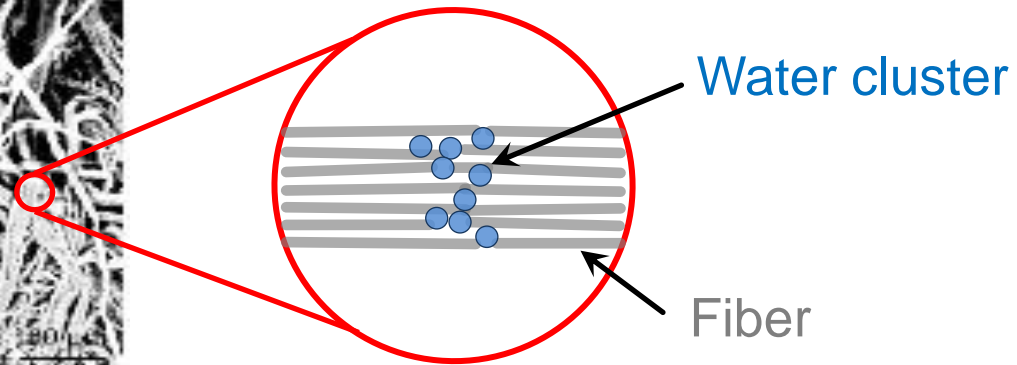
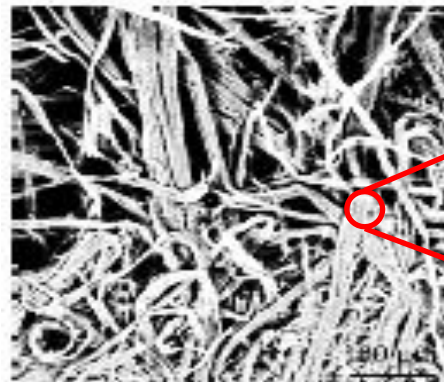
book printed in 1575 (Frankfurt)



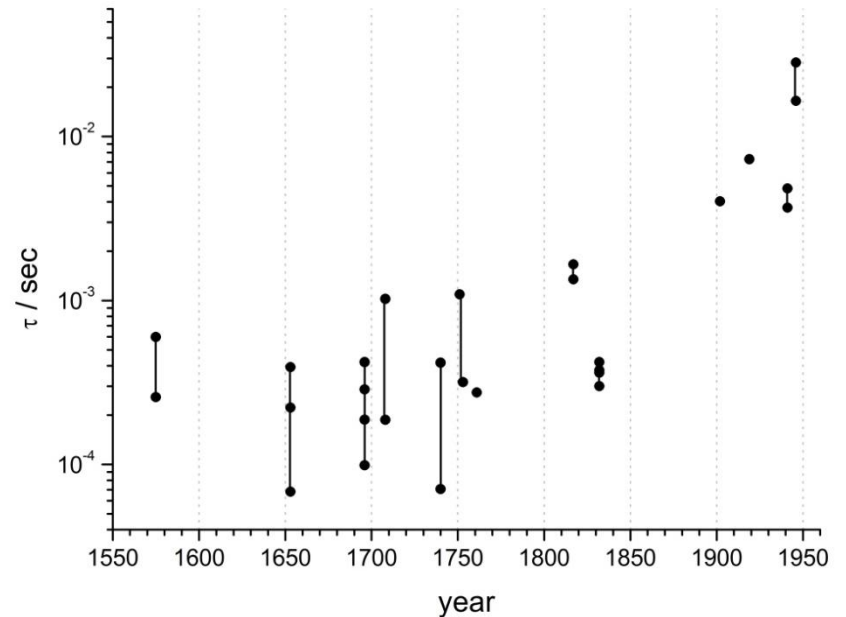
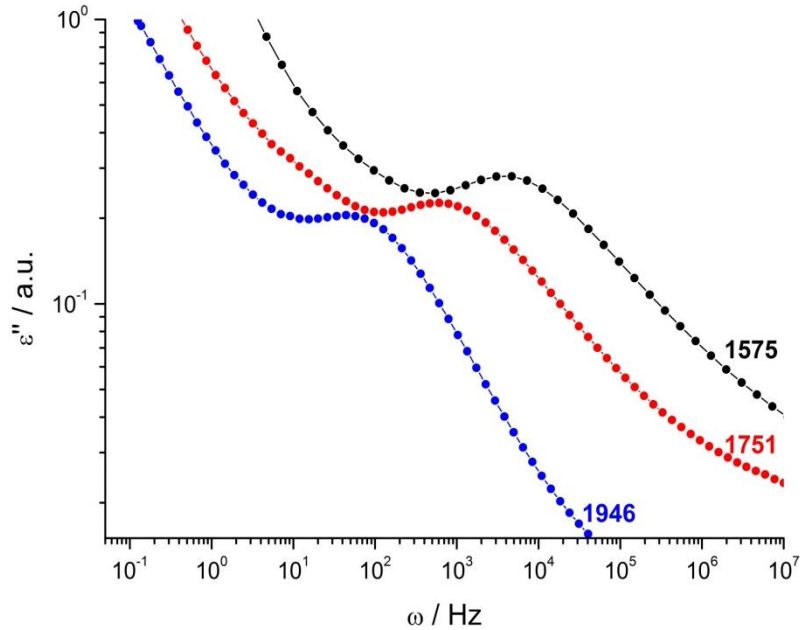
book printed in 1653 (?)



- Cellulose fibers:
- random network
 - inhomogeneous

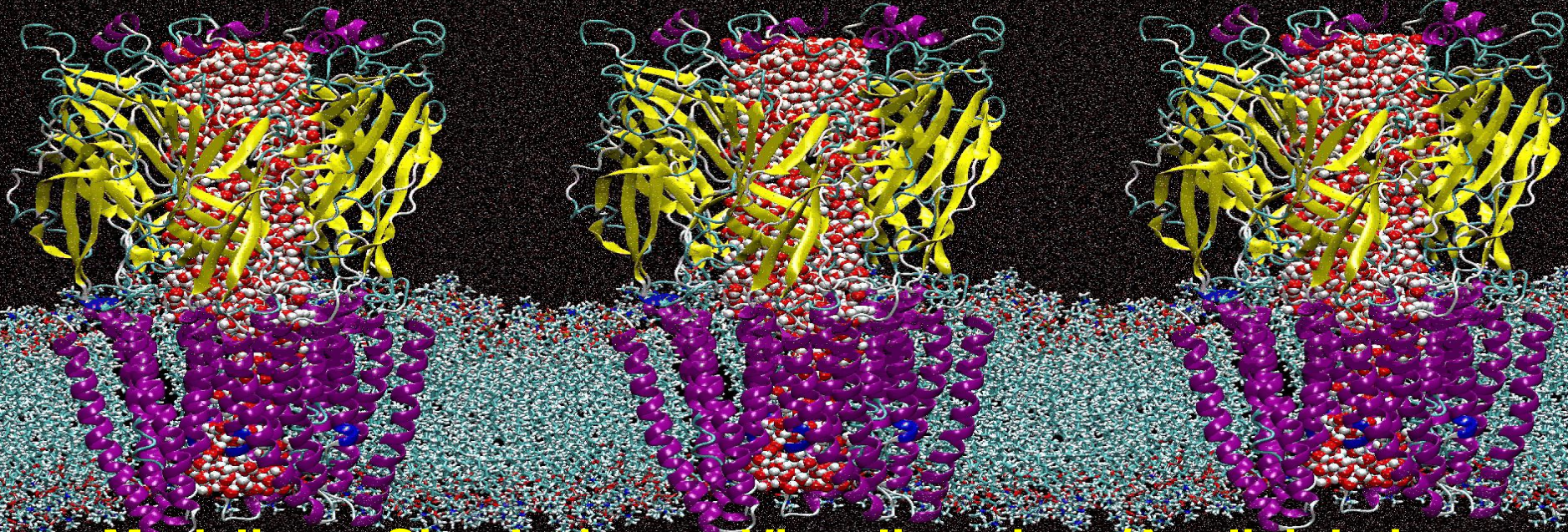


Rilassamento dell'acqua in carta antica misurato con spettroscopia dielettrica



Simulazione di Dinamica Molecolare

E' la tecnica numerica che consente di simulare il moto di un sistema di particelle e di misurarne *proprietà di equilibrio e di trasporto*



Modeling > Simulazione > Visualizzazione/Analisi dati:
High Performance Computing

