

Simulazione di proprieta' strutturali e dinamiche di proteine

Simone Melchionna

Department of Chemistry, University of Cambridge

Negli ultimi anni sono stati sviluppate alcune "tools" computazionali al fine di studiare nel dettaglio le proprieta' di interesse biofisico di proteine. Lo strumento computazionale di maggiore utilita', al fine di analizzare proprieta' micro e mesoscopiche, e' la Dinamica Molecolare. Lo sforzo di ricerca ha portato a sviluppare il programma DL-PROTEIN (S.Melchionna e S.Cozzini, 1998) distribuito alla comunita' internazionale in modalita' shareware. Questo codice permette notevoli avanzamenti rispetto ai tradizionali codici commerciali (Gromos, Charmm, Amber) sia per quanto riguarda la flessibilita' dei force fields utilizzabili (in principio si possono usare tutti i force field abituali adattando nel caso i parametri di interazione) e sia per la trattazione dettagliata delle interazioni microscopiche (ad esempio circa la delicata questione dell'elettrostatica).

L'uso massiccio di questo nuovo programma ha prodotto risultati molto incoraggianti nello studio di proteine quali la Superossido Dismutasi Bovina e la Mioglobina di Capodoglio. Abbia investigato alcune proprieta' che nel passato hanno prodotto risultati controversi, quali le fluttuazioni atomiche (fattori di Debye-Waller), la loro dispersione sull'estensione proteica, e proprieta' di respirazione collettiva di queste proteine. Lo stato termodinamico e' stato studiato in diverse condizioni di temperatura e pressione.

I risultati hanno mostrato un notevole miglioramento rispetto ai dati ottenuti con precedenti simulazioni e codici, e quindi un accordo quantitativo con gli esperimenti. In particolare abbiamo ottenuto informazioni primarie circa l'interpretazione della transizione quasi-vetrosa in proteine e l'analisi di modi localizzati su diverse scale spaziali.

REFERENZE

- [1] S. Melchionna e S. Cozzini, "DLPROTEIN 1.2 User Manual", 1997.
- [2] S. Melchionna e G.Ciccotti, J.Chem.Phys., 106(1997), 195.
- [3] S. Melchionna, M., Falconi e A. Desideri, J.Chem.Phys. 108(1998), 6033.
- [4] S. Melchionna e A. Desideri, submitted to Phys. Rev. E (1999).