



DESIR

Deposizioni per ElectroSpray Ionization e biosensoRi

***Studio computazionale dell'interazione enzima-solvente ed
enzima-supporto***

Kick-off Meeting
Montelibretti 12 Settembre 2018

Unità di Ricerca del WP2

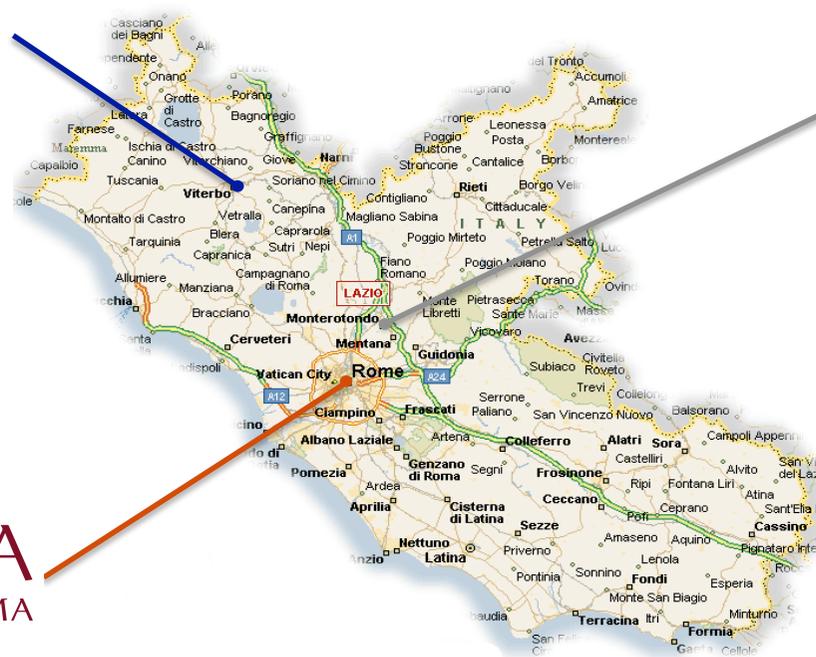
(Studio computazionale dell'interazione enzima-solvente ed enzima-supporto)



UNIVERSITÀ
DEGLI STUDI DELLA
Tuscia



CNR
Istituto di Struttura
della Materia



SAPIENZA
UNIVERSITÀ DI ROMA

Obiettivi del WP2

Studio con risoluzione atomico/molecolare delle varie fasi della deposizione ESD.

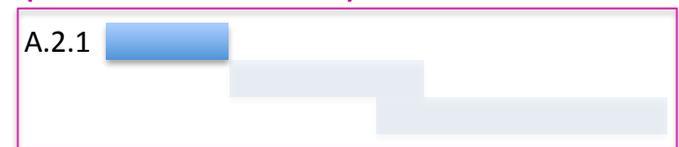
- ✓ Effetto dell'idratazione sulla struttura e sull'attività della laccasi.
- ✓ Interazione, in assenza e presenza di acqua, della laccasi con supporti solidi per biosensori.
- ✓ Razionalizzare i parametri chiave per migliorare, sulla base dei calcoli teorici, la deposizione di laccasi su supporto solido.

WP2 Details

Attività 2.1

Scelta e sviluppo delle metodologie computazionali.

(Mese 1- Mese 6)



Attività 2.2

Studio dell' interazione enzima-solvente e confronto della struttura molecolare dell'enzima in fase liquida e gassosa.

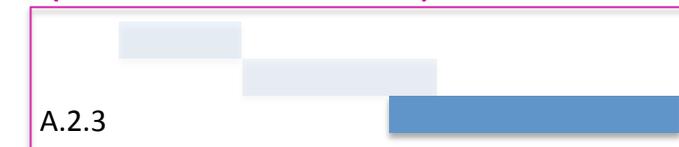
(Mese 7- Mese 15)



Attività 2.3

Studio dell' interfaccia enzima/supporto nei sistemi di interesse del progetto.

(Mese 13- Mese 26)



Attività 2.1

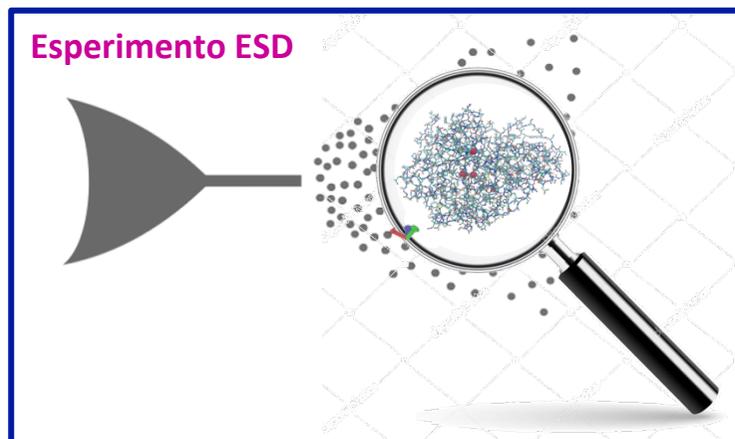
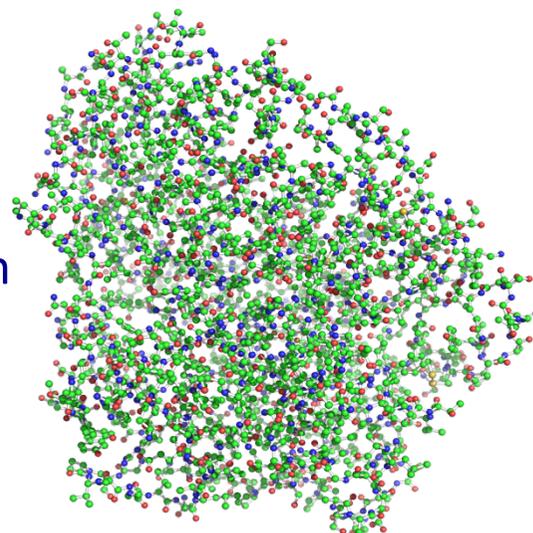
Scelta e sviluppo delle metodologie computazionali

Chimica Computazionale

Biofisica Computazionale



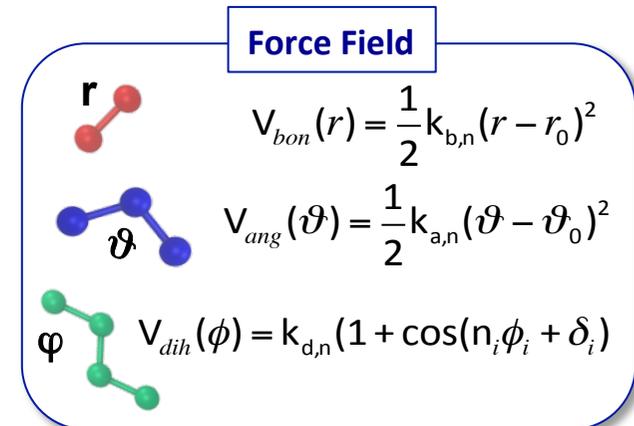
Studio del sistema
molecolare attraverso un
modello



Attività 2.1

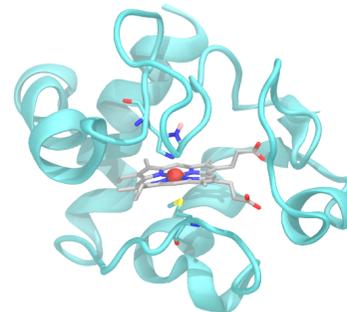
Scelta e sviluppo delle metodologie computazionali

- ✓ Scelta di un appropriato force field (GROMOS (G53A6), OPLS-AA/L, CHARMM)
- ✓ Scelta dei parametri per le simulazioni di dinamica molecolare.
- ✓ Validazione della metodologia scelta.

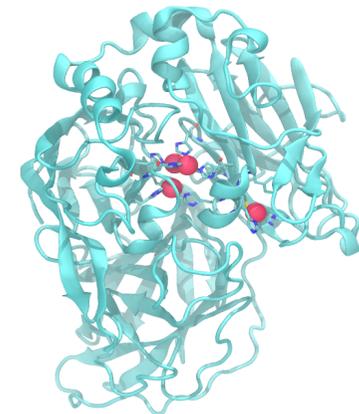


Proteine scelte per lo studio:

- Citocromo C
- Laccasi



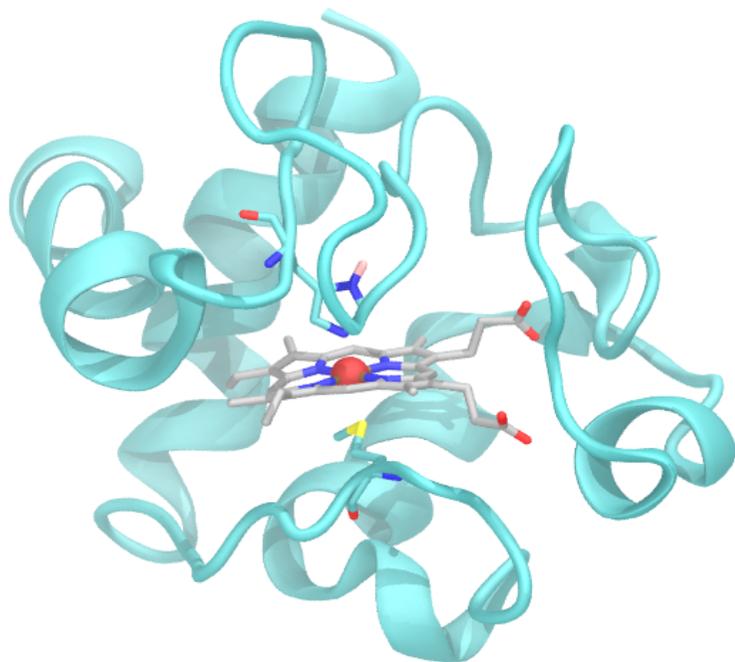
Citocromo C



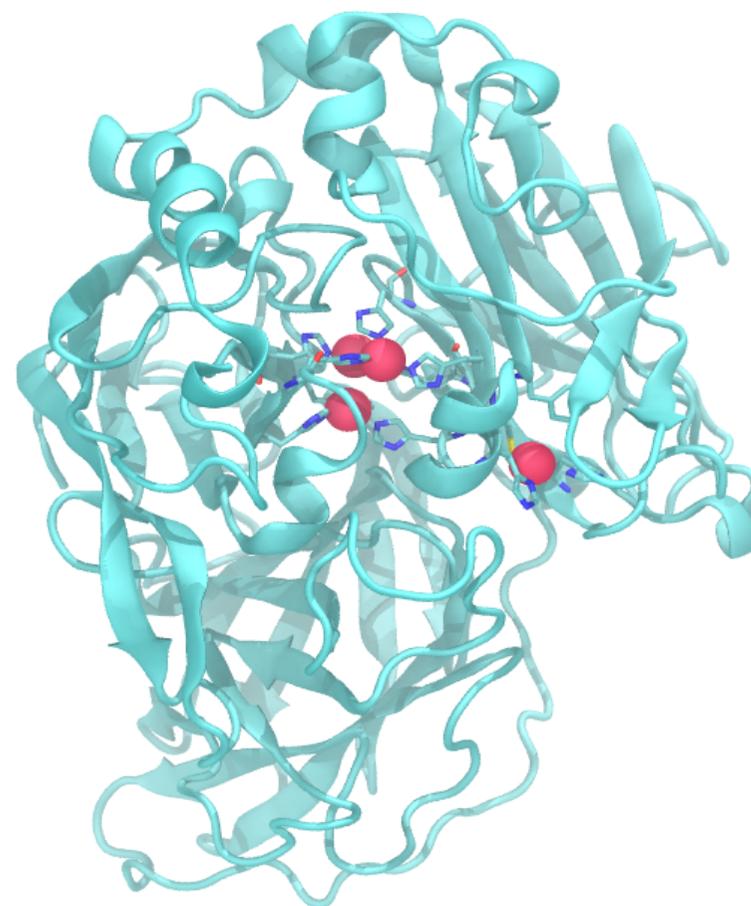
Laccasi

Attività 2.1

Scelta e sviluppo delle metodologie computazionali



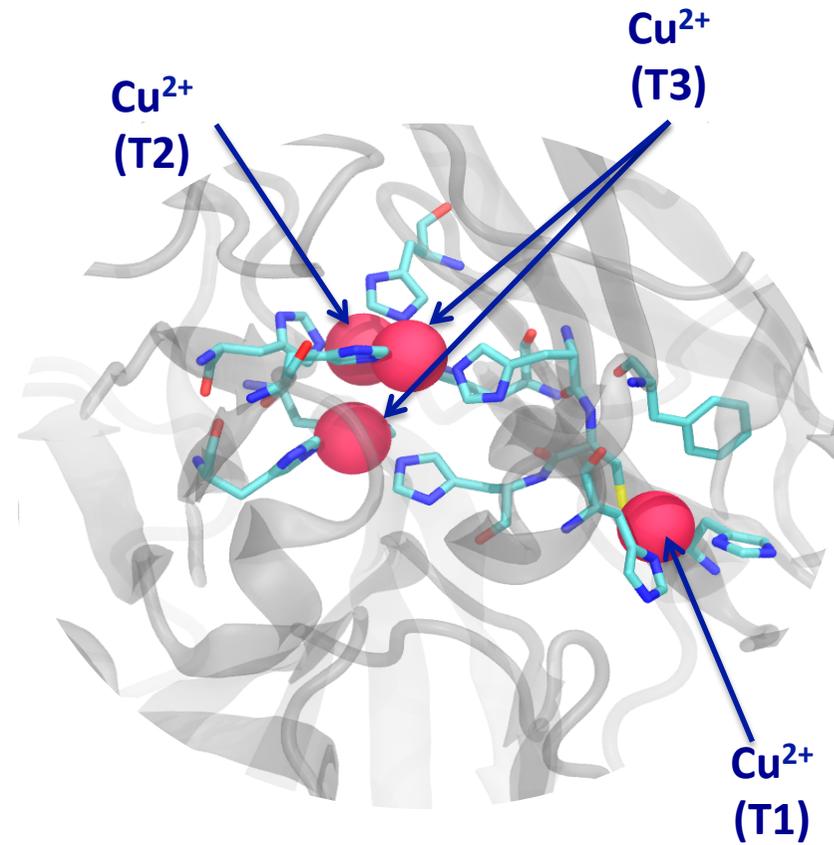
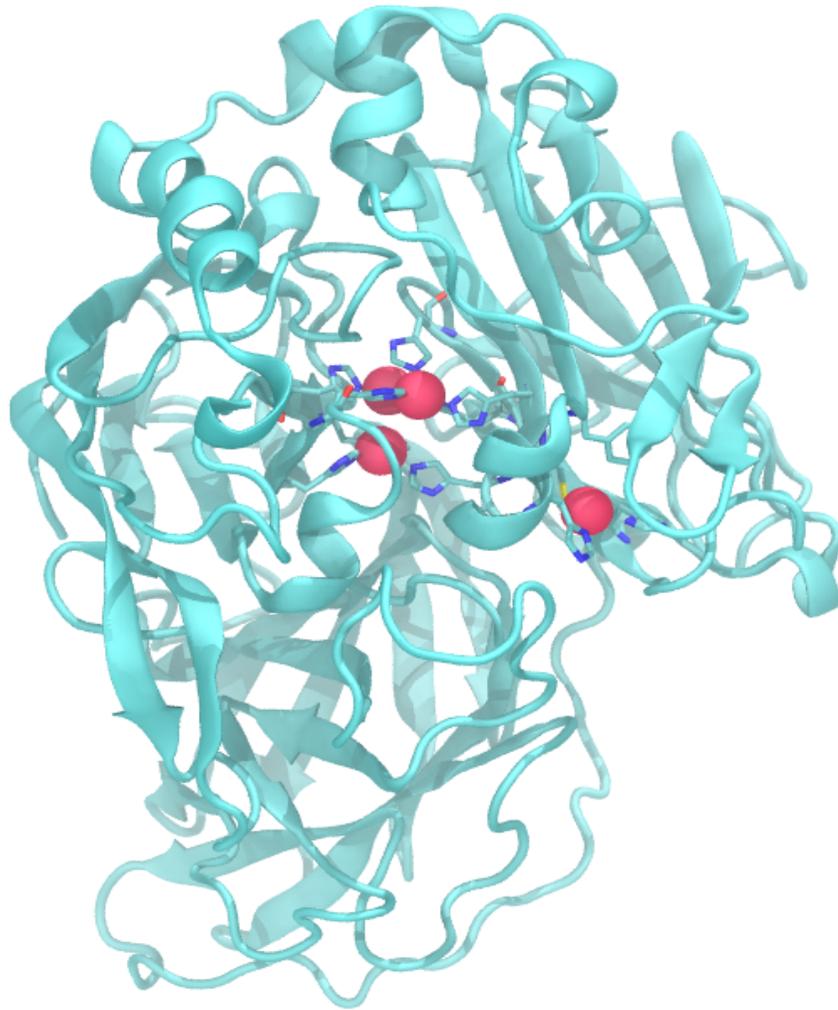
Citocromo C
(1AKK.pdb, 104 aminoacidi)



Laccasi
(2HZH.pdb, 499 aminoacidi)

Attività 2.1

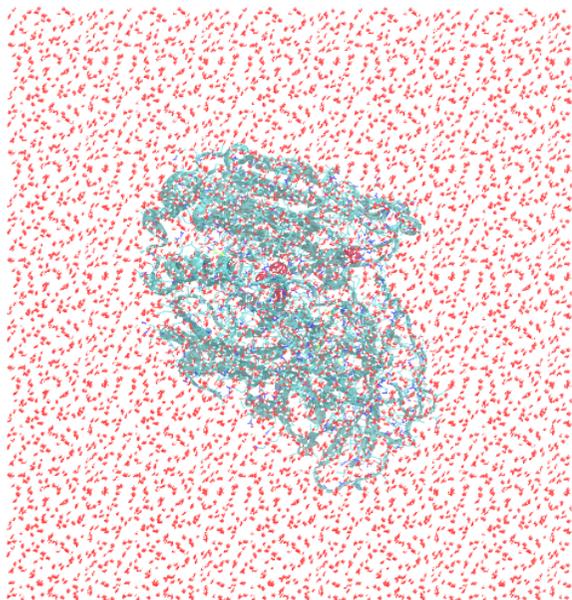
Scelta e sviluppo delle metodologie computazionali



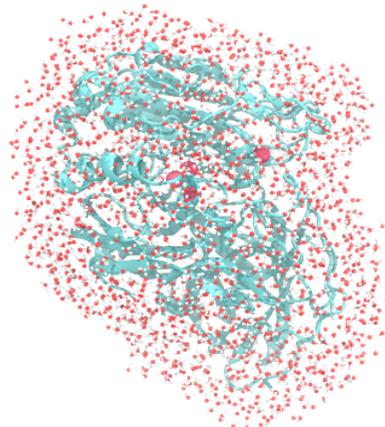
Attività 2.2

Studio dell' interazione enzima-solvente e confronto della struttura molecolare dell'enzima in fase liquida e gassosa

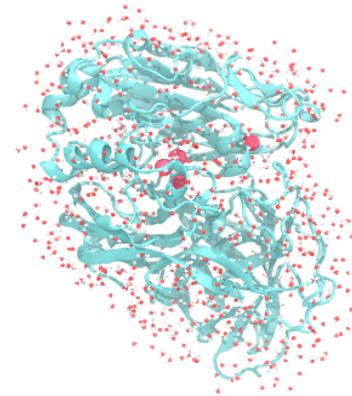
- ✓ Valutazione dell'effetto dell'idratazione sulla struttura, dinamica e funzionalità dell'enzima



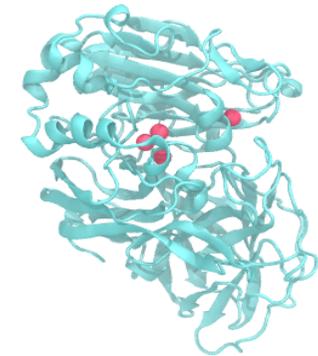
Laccasi in bulk



6.0 Å



3.0 Å



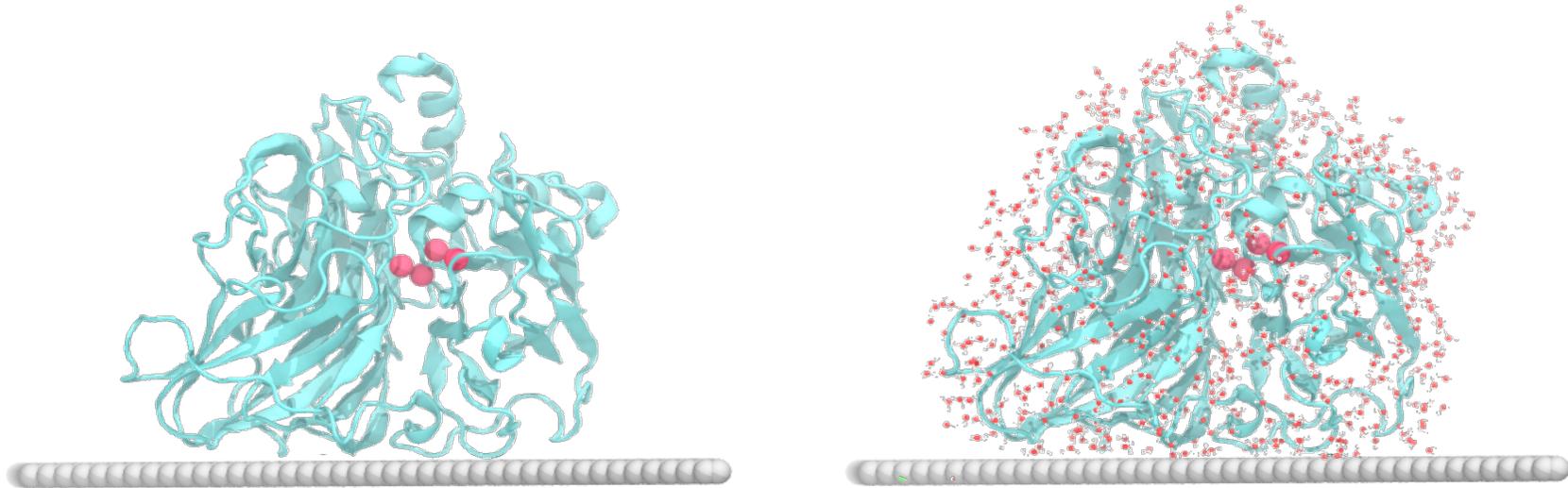
0.0 Å

Spessore dello strato di acqua

Attività 2.3

Studio dell' interfaccia enzima/supporto nei sistemi di interesse del progetto.

- ✓ Interazione laccasi con supporti solidi in assenza di acqua (mica, grafene, ossido di grafene)
- ✓ Interazione laccasi con supporti solidi in presenza di acqua
- ✓ Confronto con i dati sperimentali.



WP2 Facilities

Le simulazioni di dinamica molecolare verranno effettuate su una workstation appositamente acquistata e dedicata al progetto.

Workstation HP Z6

CPU: 1 CPU da 96 GB (3x32GB)

GPU: NVIDIA Quadro P5000 16 GB

