

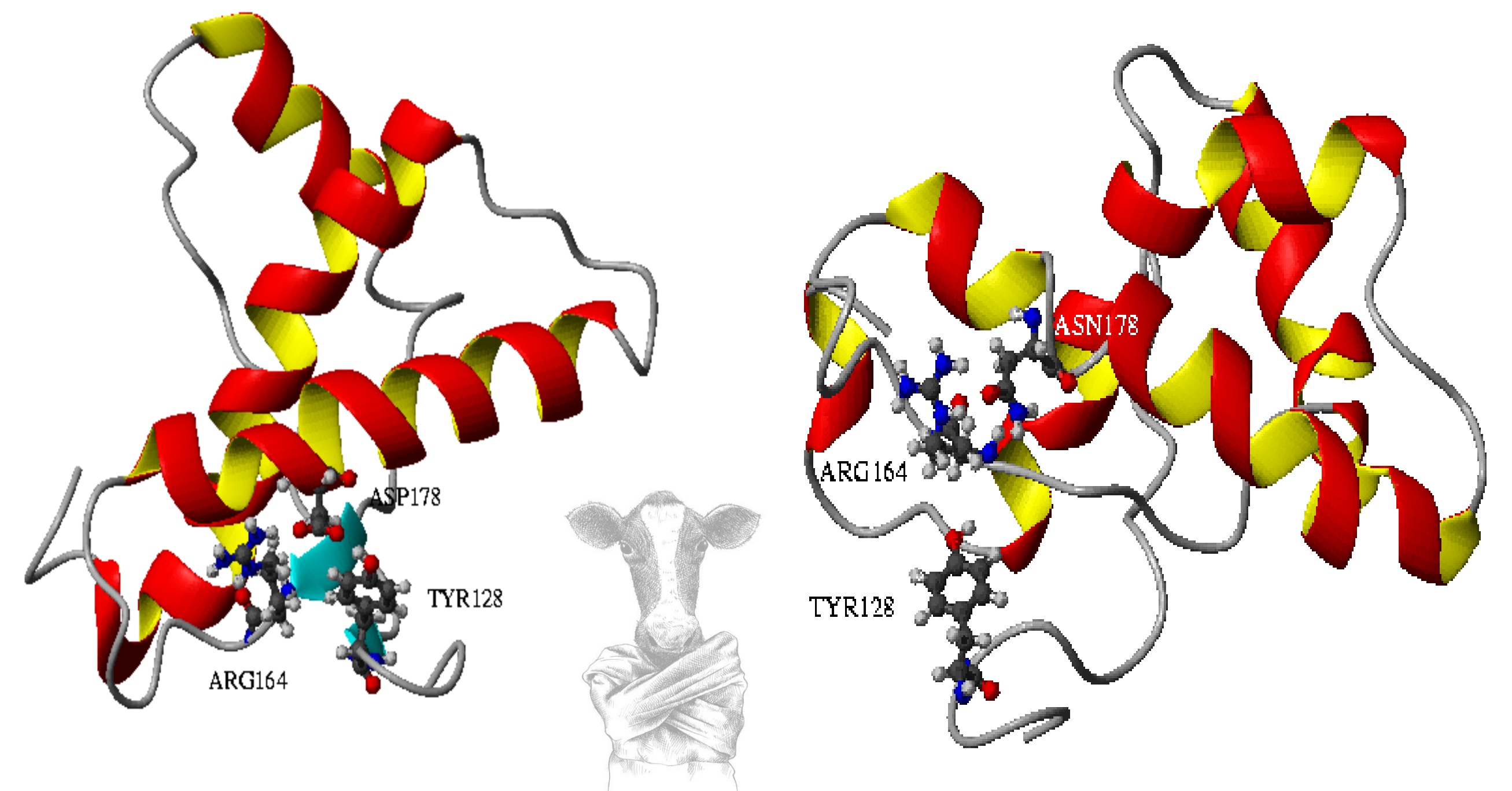
# CHIMICA FISICA COMPUTAZIONALE

Dipartimento di Chimica e LENS (European Laboratory for Nonlinear Spectroscopy)

G. Cardini, R. Chelli, M. Muniz-Miranda, M. Pagliai, P. Procacci, G.F. Signorini

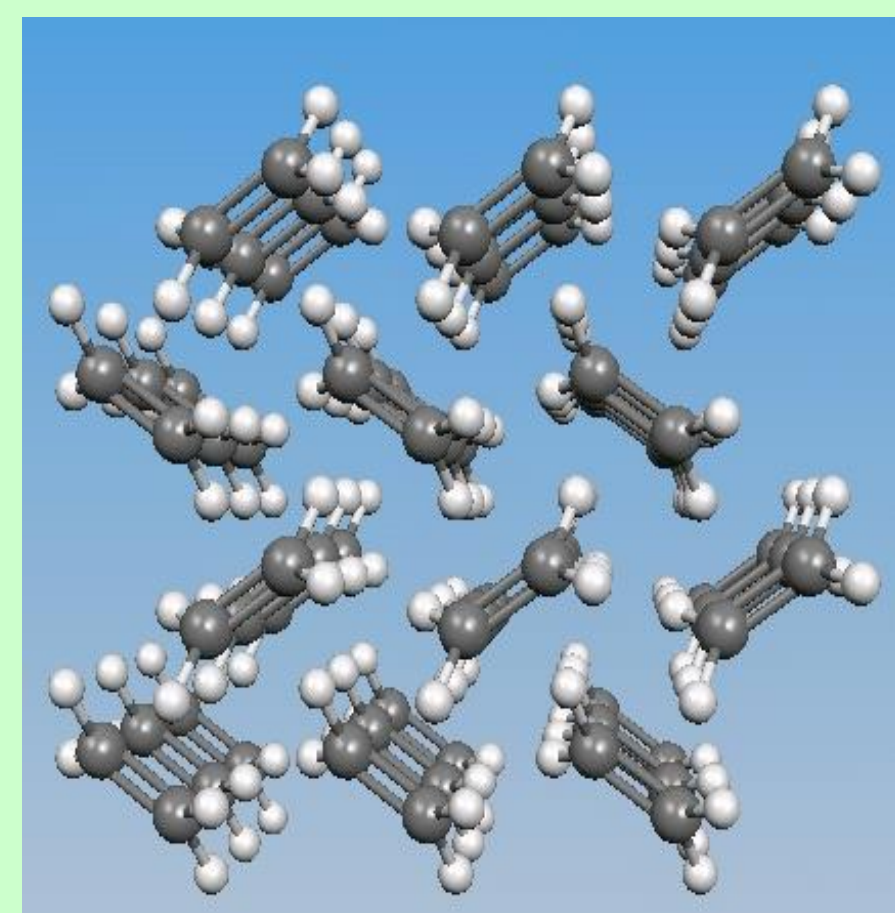
info @ 0554573072 gianni.cardini@unifi.it

**I PRIONI** Alcune malattie neurodegenerative (sindrome della mucca pazza, morbo di Creutzfeld-Jacob) sono causate dalla conversione strutturale di una proteina cellulare (PrPc) in una sua isoforma patogena. Le simulazioni di dinamica molecolare sono uno strumento utile per ottenere informazioni strutturali sulla forma patogena. In figura: a sinistra la struttura di PrPc di topo ottenuta in simulazione; a destra la struttura del mutante D178N.

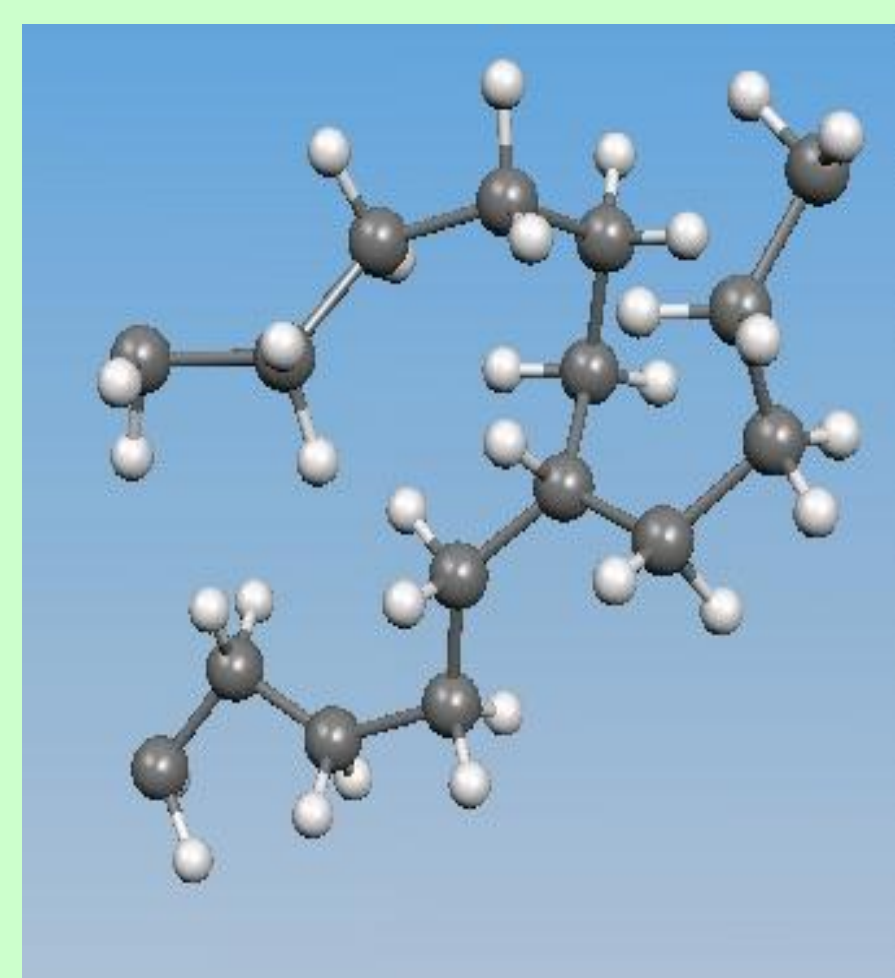


L'effetto destabilizzante della mutazione D178N sul  $\beta$ -foglietto (zona azzurra nella struttura di sinistra) è dovuta alla perdita di importanti interazioni fra alcune catene laterali in seguito alla sostituzione ASP178  $\rightarrow$  ASN178.

## Struttura e reattività di alcheni sotto pressione



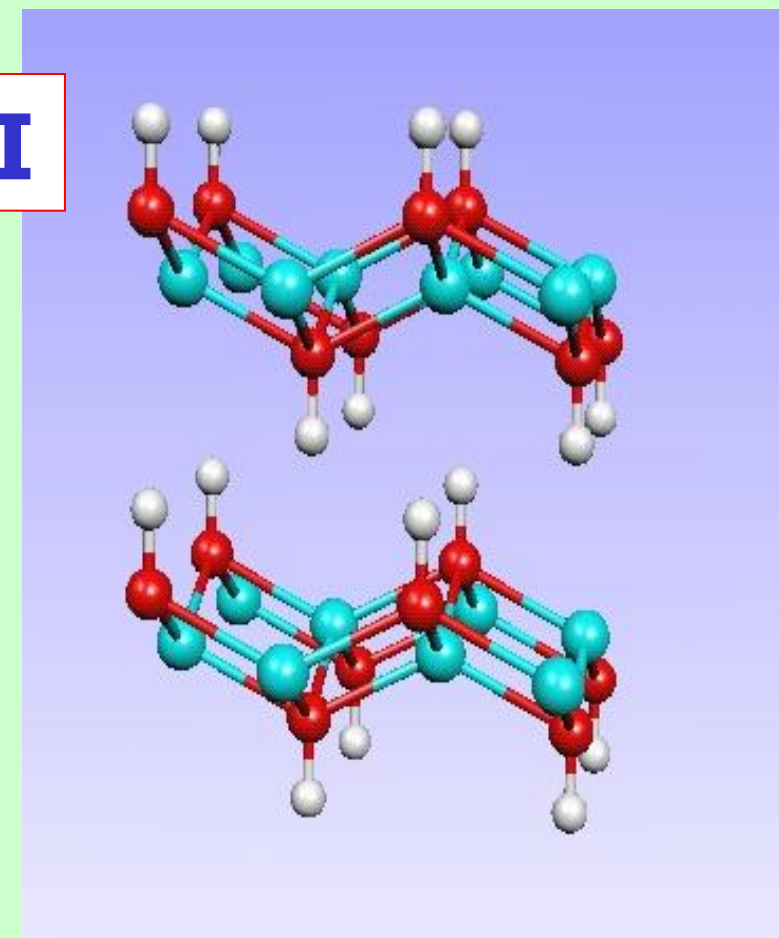
Cristallo di etilene prima della reazione



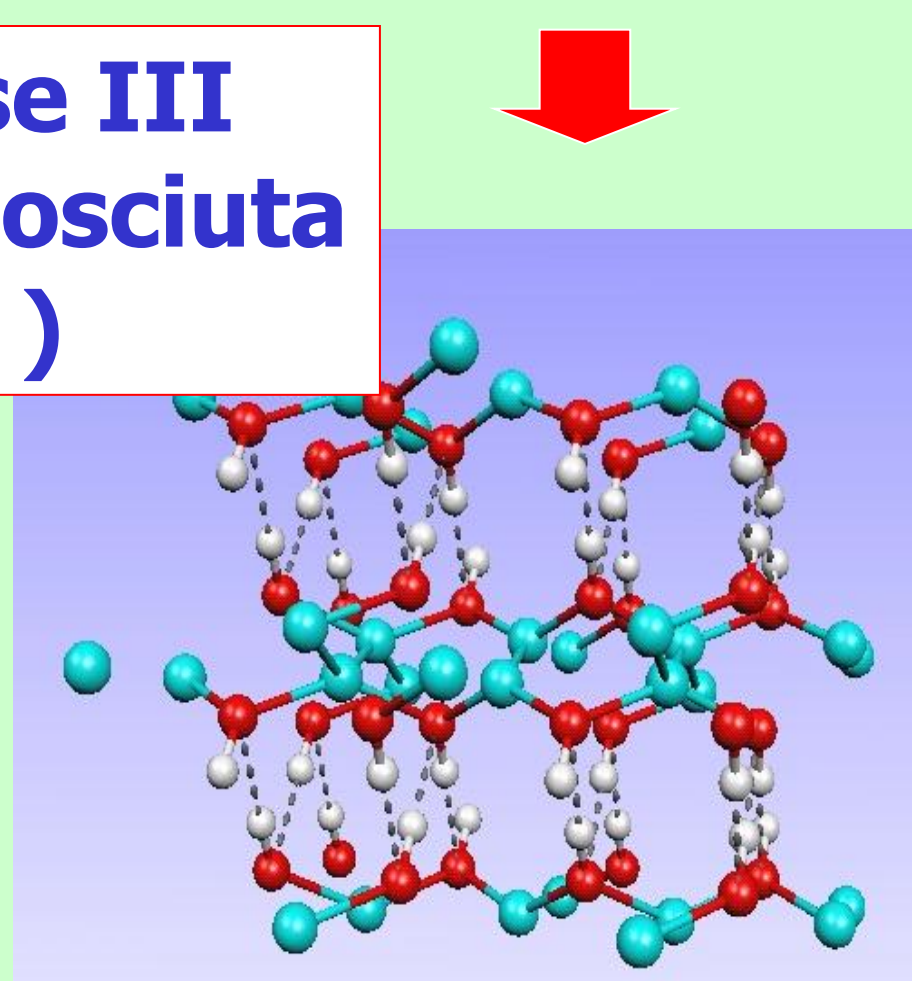
Uno dei prodotti di reazione

## Transizioni di fase indotte dalla pressione

Fase II



Fase III  
(sconosciuta)



Transizione di fase nell'idrossido di litio anidro sotto pressione

## CRISTALLI SOTTO PRESSIONE

Lo studio della reattività e delle transizioni di fase di sistemi complessi in condizioni estreme di temperature o pressione può risultare molto complicato e richiedere apparecchiature molto costose. Il recente sviluppo degli strumenti di calcolo ha consentito di ridurre i tempi necessari per ottenere simulazioni accurate. Pertanto, la dinamica molecolare rappresenta un valido metodo per la caratterizzazione strutturale e dinamica di questi sistemi.

## MODELLIZZAZIONE AB INITIO DI NANOPARTICELLE METALLICHE

(per simulare le proprietà spettroscopiche di molecole adsorbite). Le molecole adsorbite su superfici nanostrutturate di Ag, Au o Cu presentano intensificazione di 6-7 ordini di grandezza del segnale Raman ad esse attribuibile per effetto SERS (surface-enhanced Raman scattering). Calcoli effettuati con la teoria del funzionale densità permettono di simularne in dettaglio lo spettro SERS, previa modellizzazione della superficie metallica su cui le molecole si adsorbono, come mostrato in figura per l'isotiazolo su argento.

