

Esperimenti al Computer su Sistemi Biologici e Polimerici:
Dinamica Molecolare Classica con Metodi Atomistici e *Coarse-Grained*
(6 ore, 1 CFU)

Valeria Conti Nibali, Gianmarco Munaò

Con il termine Dinamica Molecolare (DM) Classica si fa riferimento ad una famiglia di metodi computazionali il cui scopo è quello di simulare il comportamento macroscopico di un sistema attraverso l'integrazione delle equazioni classiche del moto di un sistema microscopico a molti corpi. Le simulazioni DM possono fornire una visione dettagliata della struttura e della dinamica di un sistema macromolecolare di $\sim 10^5$ atomi, quale un sistema biologico o un sistema polimerico, a livello atomistico o a più bassa risoluzione (approccio *coarse-grained*), per scale temporali fino a $\sim 10^2$ nanosecondi. Esse inoltre assumono una particolare rilevanza nel condurre al computer esperimenti che non è possibile eseguire in laboratorio e nell'interpretare dati sperimentali di elevata complessità.

L'obiettivo di questo ciclo di seminari è quello di introdurre gli studenti alla tecnica della DM, riportando esempi di studi condotti su sistemi biologici, come membrane fosfolipidiche, proteine, complessi enzimatici, sistemi polimerici, materiali nanocompositi e sistemi complessi. La caratteristica peculiare di questi sistemi, che fanno parte della cosiddetta materia soffice, è quello di esibire comportamenti di autoaggregazione, che danno origine a una grande varietà di strutture sopramolecolari (come vescicole, micelle e bilayers). Verranno illustrati i principi base delle tecniche di DM atte a simulare i meccanismi che regolano questi processi, mostrando, al tempo stesso, come tale approccio possa fungere da alternativa e da complemento alle procedure sperimentali. Infine, si accennerà all'importanza della DM nel simulare le proprietà fisico-chimiche dei materiali ad oggi all'avanguardia nel campo delle nanotecnologie, dai quasicristalli ai colloidosomi.