

Chimica Fisica Biologica

Biophysical Chemistry

A.A.	2025/26	CdS	Chimica
Codice	8065835	Canale	UNICO
CFU	6	Lingua	Italiano

DOCENTE RESPONSABILE

Ester Chiessi

OBIETTIVI FORMATIVI

Italiano	<p>OBIETTIVI FORMATIVI: Conoscenza di: i) caratteristiche strutturali di macromolecole biologiche; ii) variabili termodinamiche che governano le transizioni conformazionali; iii) modelli di base delle transizioni conformazionali e del binding molecolare; iv) interazioni non-covalenti ed organizzazione di biopolimeri in soluzione acquosa; v) modelli interpretativi della catalisi enzimatica</p> <p>CONOSCENZA E CAPACITÀ DI COMPrensIONE: Sulla base degli obiettivi formativi previsti, essere in grado di comprendere la correlazione tra struttura e proprietà di sistemi bio-polimerici in ambiente acquoso</p> <p>CAPACITÀ DI APPLICARE CONOSCENZA E COMPrensIONE: Capacità di calcolo di osservabili fisiche in sistemi modello. Capacità di interpretazione di dati sperimentali in termini di proprietà molecolari.</p> <p>AUTONOMIA DI GIUDIZIO: Sulla base del confronto con le teorie studiate e dati di letteratura, saper valutare un'ipotesi operativa nell'interpretazione del comportamento sperimentale di sistemi bio-polimerici entro gli ambiti affrontati dal corso.</p> <p>ABILITÀ COMUNICATIVE: Saper formulare in modo semplice e scientificamente corretto le assunzioni e le teorie coinvolte nella razionalizzazione dei processi chimico-fisici di macromolecole biologiche affrontati nel corso. Saper riportare graficamente e discutere dati sperimentali a supporto di ipotesi di lavoro.</p> <p>CAPACITÀ DI APPRENDIMENTO: Estensione delle nozioni e concetti acquisiti all'analisi di sistemi bio-macromolecolari non affrontati nel corso e riportati nella bibliografia più recente.</p>
<i>Inglese</i>	<p>LEARNING OUTCOMES: <i>To know: i) structural features of biological macromolecules; ii) thermodynamical variables governing conformational transitions; iii) fundamental models of conformational transitions and molecular binding; iv) non-covalent interactions and assembly of biopolymers in aqueous environment; v) models for interpretation of enzyme catalysis</i></p> <p>KNOWLEDGE AND UNDERSTANDING:</p>

	<p><i>On the basis of the learning outcomes, to understand the correlation between structure and properties of biopolymer systems in aqueous environment</i></p> <p>APPLYING KNOWLEDGE AND UNDERSTANDING: <i>To estimate or compute physical observables in model systems. To interpret and relate experimental data in terms of molecular properties</i></p> <p>MAKING JUDGEMENTS: <i>On the basis of theories studied in the Course and of literature data, to be able to evaluate an operative hypothesis in the interpretation of the experimental behaviour of biopolymer systems within the subjects addressed by the Course</i></p> <p>COMMUNICATION SKILLS: <i>To be able to formulate in a simple and scientifically correct way the assumptions and theories involved in the physico-chemical processes addressed in the Course. To be able to suitably plot and discuss experimental data supporting scientific hypotheses</i></p> <p>LEARNING SKILLS: <i>To be able to apply the acquired knowledge to the analysis of biopolymer systems not discussed in the Lectures and reported in the recent literature</i></p>
--	---

PREREQUISITI

Italiano	<p>Conoscenza delle discipline chimiche di base e di nozioni fondamentali di Analisi Matematica e Fisica, acquisite durante il corso di Laurea Triennale in Chimica. In particolare: padronanza dei concetti e delle leggi chimico-fisiche che governano l'equilibrio e la cinetica chimica; familiarità con le unità di misura di osservabili chimico-fisiche e con il calcolo di quantità correlate; nozioni di calcolo differenziale ed integrale.</p>
<i>Inglese</i>	<p><i>Fundamentals of Chemistry, Physics and Mathematical Analysis, from Chemistry bachelor lectures. In particular: mastery of the chemical-physical concepts and laws that govern chemical equilibrium and kinetics; familiarity with the units of measurement of chemical-physical observables and with the calculation of related quantities; notions of differential and integral calculus.</i></p>

PROGRAMMA

Italiano	<p>Il corso si svilupperà dapprima proponendo concetti generali e di contesto sulla struttura di biopolimeri e sui fattori chimico-fisici che la stabilizzano (16 ore) quindi si focalizzerà sui due principali filoni del comportamento delle macromolecole biologiche: i) le trasformazioni strutturali indotte da variabili ambientali (12 ore); ii) l'interazione tra biopolimeri e ligandi (12 ore). In opportune fasi del corso si svolgeranno esercitazioni computazionali e numeriche volte all'applicazione dei concetti e delle nozioni acquisite (8 ore).</p> <p>Gli argomenti affrontati sono elencati nel dettaglio di seguito: Gerarchia strutturale di sistemi molecolari biologici Polimerizzazione elicoidale di subunità Struttura e funzione Dinamica locale di proteine globulari Strutture secondarie di biopolimeri e loro razionalizzazione. Proteine intrinsecamente disordinate Uso del software VMD per la costruzione e visualizzazione di strutture secondarie di oligopeptidi Dimensione di catene polimeriche. Modello della catena Gaussiana e sue evoluzioni</p>
-----------------	--



	<p>Interazioni di legami idrogeno ed elettrostatiche ed effetti del solvente per la stabilità della forma nativa di biopolimeri</p> <p>Richiami di spettroscopia elettronica di assorbimento</p> <p>Dicroismo circolare (CD): principi generali</p> <p>Transizioni helix-coil in omo-polipeptidi: Modello di Schellman. Modello di Zimm-Bragg</p> <p>Regioni elicoidali in catene polipeptidiche. Origine della transizione</p> <p>CD di proteine nel lontano UV. CD indotto. CD nel vicino UV e nel visibile</p> <p>Transizioni helix-coil in proteine: molten globule. Processo di folding. Entropia conformazionale. Entropia del solvente. Caratterizzazione termodinamica della denaturazione mediante calorimetria a scansione differenziale. Effetto isotopico del solvente su transizioni conformazionali di biopolimeri</p> <p>Binding statistico: vari tipi di costanti. Considerazioni statistiche. Numero medio di siti occupati e sua varianza. Grado di saturazione. Linearizzazione della funzione tipo Langmuir (plot di Scatchard). Esempi di binding legante-macromolecola</p> <p>Energia libera standard di binding</p> <p>Binding cooperativo. Modello di Hill. Modello allosterico</p> <p>Catalisi enzimatica. Modelli dell'entropia di attivazione. Modello della stabilizzazione del complesso attivato. Cinetiche iperboliche. Grafico di Lineweaver-Burk. Grafico di Hanes. Cinetiche iperboliche ed isoterma di Langmuir. Cinetiche sigmoidali non-cooperative. Cinetiche cooperative. Modello di Hill. Modello MWC</p> <p>Cinetiche di rilassamento. Cinetiche di processi controllati dalla diffusione</p> <p>Possibili approfondimenti:</p> <p>Attivazione termica della mobilità locale di sistemi bio-macromolecolari: transizione dinamica. Grado di idratazione ed attività biologica</p> <p>Previsione computazionale della struttura di proteine</p> <p>Analoghi sintetici di biopolimeri</p>
Inglese	<p><i>The course will first propose general and contextual concepts on the structure of biopolymers and on the chemical-physical factors that stabilize it (16 hours) and will then focus on the two main aspects of the behavior of biological macromolecules: i) the structural transformations induced by environmental variables (12 hours); ii) the interaction between biopolymers and ligands (12 hours). In appropriate phases of the course, computational and numerical exercises will be carried out aimed at applying the concepts and notions acquired (8 hours).</i></p> <p><i>The detailed list of treated topics is reported below:</i></p> <p><i>Structural hierarchy of biological molecular systems</i></p> <p><i>Helical polymerization of subunits</i></p> <p><i>Structure and function</i></p> <p><i>Local dynamics of globular proteins</i></p> <p><i>Secondary structures of biopolymers and their rationalization. Intrinsically disordered proteins</i></p> <p><i>Use of VMD software for the construction and visualization of secondary structures of oligopeptides</i></p> <p><i>Size of polymer chains. Model of the Gaussian chain and its evolutions</i></p> <p><i>Hydrogen bonding, electrostatic interactions and solvent effects for the stability of biopolymers native form</i></p> <p><i>Notes of electronic absorption spectroscopy</i></p> <p><i>Circular dichroism (CD): general principles</i></p> <p><i>Helix-coil transitions in homo-polypeptides: Schellman model. Zimm-Bragg model</i></p> <p><i>Helical regions in polypeptide chains. Origin of the transition</i></p> <p><i>Far-UV protein CDs. Induced CD. CD in the near UV and visible</i></p> <p><i>Helix-coil transitions in proteins: molten globule. Folding process. Conformational entropy. Entropy of the solvent. Thermodynamic characterization of denaturation by differential scanning calorimetry. Isotope effect of solvent on conformational transitions of biopolymers</i></p>

	<p><i>Statistical binding: various types of constants. Statistical considerations. Average number of occupied sites and its variance. Degree of saturation. Linearization of the Langmuir-like function (Scatchard plot). Examples of ligand-macromolecule binding</i></p> <p><i>Binding standard free energy</i></p> <p><i>Cooperative binding. Hill model. Allosteric model</i></p> <p><i>Enzyme catalysis. Activation entropy models. Model of the stabilization of the activated complex. Hyperbolic kinetics. Lineweaver-Burk plot. Hanes chart. Hyperbolic kinetics and Langmuir isotherm. Non-cooperative sigmoidal kinetics. Cooperative kinetics. Hill model. MWC model</i></p> <p><i>Relaxation kinetics. Kinetics of diffusion-controlled processes</i></p> <p><i>Possible further topics:</i></p> <p><i>Thermal activation of local mobility of bio-macromolecular systems: dynamic transition.</i></p> <p><i>Degree of hydration and biological activity</i></p> <p><i>Computational prediction of protein structure</i></p> <p><i>Synthetic analogues of biopolymers</i></p>
--	--

TESTI ADOTTATI E BIBLIOGRAFIA

Italiano	<p>B. Pispisa, Chimica Fisica Biologica, Aracne ed., 2010</p> <p>Bibliografia di riferimento: Cantor Schimmel, Biophysical Chemistry, W. H. Freeman and Company ed., 1980 A. Cooper, Biophysical Chemistry, 2nd edition, RSC Publishing, 2011</p>
<i>Inglese</i>	<p><i>B. Pispisa, Chimica Fisica Biologica, Aracne ed., 2010</i></p> <p><i>Reference Bibliography:</i> <i>Cantor Schimmel, Biophysical Chemistry, W. H. Freeman and Company ed., 1980</i> <i>A. Cooper, Biophysical Chemistry, 2nd edition, RSC Publishing, 2011</i></p>

MODALITÀ DI SVOLGIMENTO

Italiano	<p>Lezioni frontali ed esercitazioni numeriche/computazionali sugli argomenti del corso, anche con l'ausilio di diapositive esplicative. Per gli argomenti trattati alla lavagna vengono fornite le note del docente scansionate su file pdf. Una specifica esercitazione viene svolta mediante software per visualizzazione molecolare. Sono previsti approfondimenti di questioni o risultati dalla letteratura scientifica su proposta dello studente.</p> <p>Il materiale didattico (presentazioni, articoli di letteratura, fogli di calcolo, note manoscritte) è reso disponibile mediante la piattaforma Teams.</p> <p>Gli studenti possono usufruire di spiegazioni individuali durante l'orario di ricevimento del docente (una sessione di 2 ore a settimana).</p>
<i>Inglese</i>	<p><i>The course consists of teacher-led lessons on the topics of the program, also using explanatory slides. For the topics treated on the blackboard, teacher's notes are provided, scanned into PDF files. Computing sessions for biomolecule visualization and data elaboration are also performed. Analysis of issues or literature results possibly proposed by students are addressed.</i></p> <p><i>The teaching material (presentations, scientific papers, computing files, handwritten notes) is provided by Teams.</i></p> <p><i>One-to-one instruction of students on demand (one 2-hours session/week) is available.</i></p>

MODALITÀ DI VALUTAZIONE

Prova orale

<p>Italiano</p>	<p>L'esame consiste in un colloquio orale volto a verificare il livello di conoscenza degli argomenti svolti e la capacità di utilizzare tali conoscenze nell'interpretazione di proprietà e processi che coinvolgono biopolimeri.</p> <p>Vengono proposte tre domande su argomenti svolti. Una quarta domanda è possibile in caso di risposta insoddisfacente ad una delle tre domande precedenti o per l'assegnazione della lode.</p> <p>L'esame è superato se si risponde in modo soddisfacente ad almeno tre domande su quattro, intendendo per soddisfacente una risposta in cui non si evidenziano errori di comprensione e sono esposte le basi dell'argomento.</p> <p>La votazione finale è espressa in trentesimi (votazione minima per il superamento dell'esame: 18/30) e viene stabilita secondo i seguenti criteri:</p> <p>18-21, lo studente ha acquisito i concetti di base della disciplina e si esprime con un linguaggio sufficientemente corretto ed appropriato.</p> <p>22-25, lo studente ha acquisito in modo approfondito i concetti di base della disciplina ed è adeguatamente in grado di effettuare i collegamenti tra le varie materie. Presenta linearità nella strutturazione del discorso. Il linguaggio è appropriato e corretto.</p> <p>26-29, lo studente possiede un bagaglio di conoscenze completo e ben strutturato. È in grado di applicare e rielaborare autonomamente le conoscenze acquisite. Mette in evidenza una ricchezza di riferimenti e capacità logico-analitiche con un linguaggio fluido, appropriato e vario.</p> <p>30 e 30 e lode, lo studente possiede una base di conoscenze completa e approfondita. È in grado di applicare la conoscenza a casi e problemi complessi ed estenderla a nuove situazioni. I riferimenti culturali sono ricchi e aggiornati. Si esprime con brillantezza e perfetta proprietà di linguaggio.</p>
<p><i>Inglese</i></p>	<p><i>The exam consists of an interview aimed at verifying the level of knowledge of the Course topics and the ability to use this knowledge in the interpretation of properties and processes of biopolymers.</i></p> <p><i>Three questions on the topics of the Course are proposed. A further question is possible in case of failure in one of the three questions or to assign honour.</i></p> <p><i>The exam is passed if at least three out of four questions are satisfactorily answered. A question is considered as satisfactorily answered in the absence of major errors and when the basic concepts on the topic are exposed.</i></p> <p><i>The final score is expressed in thirtieths (minimum score to pass the exam: 18/30) and it is decided according to the following criteria:</i></p> <p><i>18-21, the student has acquired the basic concepts of the discipline and can formulate them with a sufficiently correct and appropriate language.</i></p> <p><i>22-25, the student has acquired in depth the basic concepts of the discipline and is adequately able to make the connections between the various subjects. He/She shows linearity in the structuring of speech. The language is appropriate and correct.</i></p> <p><i>26-29, the student has a complete and well-structured set of knowledge. He/She is able to independently apply and re-elaborate the acquired knowledge. He/She highlights a wealth of references and logical-analytical skills with a fluid, appropriate and varied language.</i></p> <p><i>30 and 30 cum laude (honour), the student has a complete and in-depth knowledge background. He/She is able to apply knowledge to complex cases and problems and extend it to new situations. The cultural references are rich and up-to-date. He/She can discuss the Course topics with brilliance and perfect language ability.</i></p>

MODALITÀ DI FREQUENZA

Frequenza facoltativa

<p>Italiano</p>	<p>La frequenza alle lezioni è facoltativa.</p>
<p><i>Inglese</i></p>	<p><i>The attendance of teacher-led lessons is elective.</i></p>