

## RELAZIONE DELL'ATTIVITA' DI RICERCA SVOLTA NEL PROGRAMMA STM 2016

**Fruitore:** Susanna Monti

**Istituto di afferenza:** Istituto di Chimica dei Composti Organometallici, UOS di Pisa (ICCOM-PI)

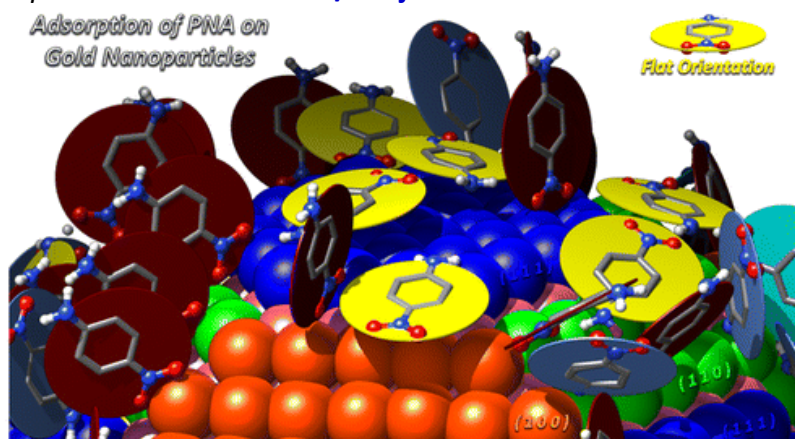
**Qualifica:** Ricercatore **Livello:** III

L'attività di ricerca svolta in collaborazione con il professor Hans Ågren ed il suo gruppo, presso il KTH di Stoccolma, nel periodo maggio-giugno (scelto per la STM), ha portato alla conclusione di una serie di lavori, iniziati in precedenza, in cui venivano utilizzati i parametri del force field classico-reattivo, sviluppati dal **fruitore**, per simulare l'adsorbimento di piccole molecole organiche [para-nitro-anilina (pNA) e cisteina (CYS)] su nanoparticelle d'oro di varie dimensioni.

I risultati sono stati pubblicati con successo sul *Journal of Chemical Theory and Computation* (ACS):

Xin Li, Vincenzo Carravetta, Cui Li, Susanna Monti, Zilvinas Rinkevicius, Hans Ågren  
**Optical Properties of Gold Nanoclusters Functionalized with a Small Organic Compound: Modeling by an Integrated Quantum-Classical Approach**

*J. Chem. Theory Comput.* 2016 DOI: [10.1021/acs.jctc.6b00283](https://doi.org/10.1021/acs.jctc.6b00283)

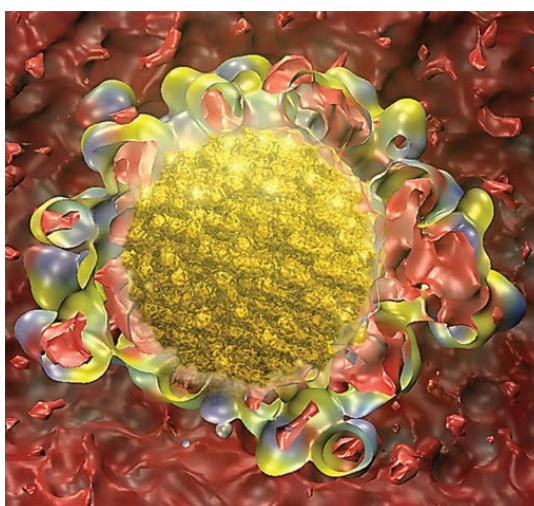


e su *Nanoscale* (RCS):

Susanna Monti, Vincenzo Carravetta, Hans Ågren

**Decoration of Gold Nanoparticles with Cysteine in Solution: Reactive Molecular Dynamics Simulations**

*Nanoscale* 2016 DOI: [10.1039/c6nr03181a](https://doi.org/10.1039/c6nr03181a)



Il **fruitore** risulta in entrambe le pubblicazioni “corresponding author”. Il **CNR** ed il **Programma Short Term Mobility 2016** sono stati citati debitamente negli Acknowledgements di entrambi i lavori.

Nel periodo trascorso al KTH sono state messe ulteriormente a punto le procedure per descrivere l'interazione di proteine e peptidi con superfici d'oro di varia morfologia. Per assicurare la validità delle tecniche e l'affidabilità della descrizione dei sistemi prodotta dal campo di forze è stato necessario simulare l'adsorbimento di dimeri di cisteina (cistina = monomeri connessi da un ponte disolfuro) su superfici modello in presenza del solvente. L'importanza di queste simulazioni è legata alla presenza dei ponti disolfuro in vari sistemi proteici. Gli eccezionali risultati ottenuti, in perfetto accordo con i dati sperimentali, hanno permesso di classificare i vari meccanismi di reazione e binding, in caso di bassa ed alta concentrazione dell'adsorbato, di validare il metodo e di passare alla fase successiva. I risultati riguardanti l'adsorbimento di cistina su oro sono in corso di pubblicazione.

Come da programma, la fase successiva è consistita nella creazione di modelli di nano particelle d'oro di medie dimensioni ricoperte da catene peptidiche, contenenti cisteina, e nello studio delle loro proprietà strutturali e dinamiche in soluzione acquosa. Le simulazioni di dinamica molecolare classica reattiva a temperatura ambiente dei complessi solvatati sono in corso su sistemi HPC italiani e svedesi ed i risultati serviranno a valutare:

- 1) i meccanismi di binding dei peptidi all'oro;
- 2) le caratteristiche degli strati biomolecolari adsorbiti (i.e. copertura, interazioni intermolecolari, etc.);
- 3) la stabilità in soluzione delle nano particelle funzionalizzate rispetto a quelle non ricoperte;
- 4) l'interazione in soluzione tra nano particelle funzionalizzate

Anche se sono già stati raccolti dati illuminanti riguardo agli aspetti sopra menzionati, riteniamo che, date le dimensioni e la complessità dei sistemi in studio, sia necessario estendere notevolmente l'entità ed i tempi dei campionamenti (dati strutturali e dinamici) per poter avere un più diretto confronto con il dato sperimentale.

La figura sottostante è una snapshot estratta dalla simulazione più complessa in cui due nano particelle funzionalizzate si muovono liberamente in soluzione acquosa.

