

# AVVISO

Sono disponibili tesi di laurea e tirocini esterni da svolgersi presso l'Istituto di Cristallografia del CNR di Bari (Via Amendola 122/o), sotto la guida del Prof. Rocco Caliandro, riguardanti i seguenti argomenti:

## **Studio di algoritmi per la determinazione della struttura cristallina di proteine**

La struttura tridimensionale di proteine e di composti proteina-farmaco può essere ottenuta mediante un esperimento di diffrazione di raggi X. Le biomolecole sono sottoposte ad un processo di cristallizzazione ed i cristalli ottenuti sono irradiati con un fascio di raggi X da sincrotrone. I dati raccolti sono processati con l'obiettivo di recuperare l'informazione di fase mancante, permettendo dunque di ottenere l'immagine della struttura cristallizzata. Il recupero della fase soffre di importanti limitazioni ed è ad oggi possibile solo in condizioni particolarmente favorevoli (cristalli ordinati, biomolecole contenenti atomi pesanti, presenza di informazioni sperimentali aggiuntive). L'attività di tesi riguarderà lo sviluppo e l'applicazione di metodi computazionali finalizzati al miglioramento del processo di determinazione strutturale di biomolecole mediante esperimenti di diffrazione di raggi X. Saranno analizzate proteine e composti proteina – ligando di interesse per la bioremediation.

## **Predizione della funzionalità di enzimi coinvolti in processi di biodegradazione**

La struttura tridimensionale di numerosi enzimi coinvolti in processi di biodegradazione è nota sperimentalmente attraverso la cristallografia. Questa informazione può essere utilizzata per migliorare la funzionalità degli enzimi nel degradare gli inquinanti marini o terrestri. Per ottenere questo obiettivo è necessario simulare il comportamento degli enzimi in maniera realistica e predire eventuali modifiche da apportare alla sua struttura per ottimizzarne il suo comportamento nel processo di biodegradazione. L'attività di tesi riguarderà l'applicazione di metodi computazionali che permettono di simulare i movimenti molecolari degli enzimi.

## **Analisi qualitativa e quantitativa di polveri atmosferiche**

La diffrazione a raggi X può essere usata per analizzare la composizione delle polveri atmosferiche. Essa permette di studiare le sostanze micro-cristalline in esse presenti, identificandole e determinando la loro frazione in peso. L'attività di tesi consisterà nell'analizzare gli spettri di diffrazione ottenuti dai diffrattometri in dotazione all'Istituto di Cristallografia.

Per ulteriori informazioni contattare il Prof. Caliandro tramite e-mail ([rocco.caliandro@ic.cnr.it](mailto:rocco.caliandro@ic.cnr.it)) o durante l'orario di ricevimento (Lunedì, ore 10:30 – 11:30).