

CERM- Laboratorio di NMR:

Il laboratorio si occupa della caratterizzazione strutturale e dinamica di proteine e metallo proteine in soluzione e allo stato solido tramite NMR ad alta risoluzione, oltre allo studio delle interazioni tra proteine e tra proteine e piccole molecole e RNA. L'attività di ricerca ha come scopo principale la comprensione a livello atomico e molecolare di selezionati processi biologici. Questo approccio viene applicato sia tramite studi di NMR *in vitro* che direttamente in cellula, per diverse classi di proteine e metallo proteine. Inoltre tramite NMR allo stato solido si ha la possibilità di studiare una varietà di proteine, macromolecole ed altri materiali con alto peso molecolare che sono più difficoltosi da caratterizzare via NMR in soluzione come i solidi paramagnetici, le fibrille di proteine coinvolte in processi neurodegenerativi, catalizzatori composti di ispirazione biologica (enzimi intrappolati in matrice di biosilice) etc. Inoltre vengono portate avanti attività di ricerca che riguardano gli avanzamenti metodologici di spettroscopia NMR in soluzione di sistemi intrinsecamente non strutturati, sistemi paramagnetici e sistemi ad elevatissimo peso molecolare e avanzamenti metodologici di spettroscopia NMR nei solidi, soprattutto per quanto riguarda la preparazione dei campioni, che rappresenta un aspetto cruciale della metodica.

CERM- CEMET Laboratorio di metabolomica

Il laboratorio si occupa dell'acquisizione di profili NMR di vari campioni biologici. Le attività di ricerca si concentrano principalmente nel settore biomedico e in quello agroalimentare. Nel primo caso, la metabolomica via NMR viene utilizzata principalmente per la definizione del fenotipo individuale, per la valutazione dell'impronta metabolica di varie patologie (dalla celiachia, al cancro, allo scompenso cardiaco) e per l'identificazione di biomarcatori di malattie. Il gruppo di metabolomica è anche impegnato nello sviluppo di procedure operative sia analitiche che preanalitiche per assicurare standard di qualità nelle analisi metabolomiche. I campioni utilizzati per metabolomica in soluzione possono essere biofluidi (urine, siero, plasma, saliva) o estratti di cellule e tessuti; è possibile studiare quest'ultimi anche nella forma intatta attraverso HR-MAS. In campo biomedico i campioni utilizzati normalmente sono di origine umana, da modelli animali o da colture cellulari. In campo agroalimentare, la metabolomica viene principalmente utilizzata per valutare la qualità di una serie di prodotti alimentari (quali olio, vino, latte, frutta) anche in funzione della località di origine e della filiera produttiva. Vengono inoltre effettuati studi sugli effetti dell'assunzione di determinati alimenti sui profili metabolici individuali.

CERM-Laboratorio di bioinformatica

Il laboratorio si occupa sia dell'analisi strutturale di macromolecole biologiche, con particolare enfasi sullo studio di metalloproteine sia dell'analisi di sequenze genomiche per l'identificazione e la comprensione di processi cellulari. Inoltre, una parte dell'attività del laboratorio è orientata allo sviluppo di metodi di calcolo basati su piattaforme computazionali distribuite (grid, cloud) per l'interpretazione di dati NMR di macromolecole biologiche. Relativamente all'analisi strutturale e di sequenze genomiche, la ricerca del laboratorio è incentrata sullo sviluppo di metodologie specificamente disegnate per tenere conto della presenza di siti di legame per ioni metallici (o cofattori contenenti metalli), sia ai fini della corretta predizione di tali siti sia per ottenere metriche e algoritmi che sfruttino esplicitamente le proprietà strutturali di tali siti. I risultati ottenuti sono immagazzinati in database pubblici. Gli strumenti sviluppati sono poi sfruttati in casi di studio di largo interesse. Relativamente allo sviluppo di metodi di calcolo per dati NMR, tali metodi sono resi pubblicamente accessibili sotto forma di servizi web in modo da coinvolgere un'ampia platea di utenti, anche con limitate conoscenze informatiche.

CERM-Laboratorio di caratterizzazione biofisica di proteine

Misure di dicroismo circolare, fluorescenza, calorimetria, UV-visibile, light scattering e stopped flow per la caratterizzazione biofisica di proteine e metallo proteine. Le strumentazioni disponibili presso il laboratorio

di caratterizzazione di proteine consentono un'analisi completa delle macromolecole biologiche in soluzione fornendo informazioni che vanno ad integrarsi con i dati strutturali ottenuti da studi di risonanza magnetica nucleare e da misure di diffrazione di raggi X su cristallo singolo. Le analisi effettuabili presso il laboratorio sono in grado di fornire informazioni dettagliate sulla struttura secondaria delle proteine e sulla stabilità della struttura terziaria in funzione della temperatura. Le strumentazioni consentono l'analisi dello stato di aggregazione delle macromolecole in soluzione, la determinazione esatta del raggio idrodinamico e la determinazione della concentrazione esatta delle soluzioni. E' inoltre possibile studiare l'interazione fra proteine e quella fra proteine e piccole molecole caratterizzandone gli aspetti cinetici e termodinamici.