

Bando di selezione pubblica per titoli e colloquio per il conferimento di un assegno di ricerca – lettera b) di durata annuale. Proponente: Prof. Massimo Olivucci

Allegato A

○ **Titolo del progetto/Tema di ricerca in italiano:**

Sviluppo e caratterizzazione di nuove metodologie per lo studio di rodopsine naturali e rodopsine artificiali per la biologia sintetica. / Chimica computazionale

○ **Titolo del progetto/Tema di ricerca in inglese:**

Development and characterization of novel methodologies for the study of natural rhodopsins and rhodopsin mimics for synthetic biology. / Computational chemistry

○ **Settore Scientifico Disciplinare:** CHIM/06

○ **Settore concorsuale:** 03/C1

○ **Campo principale della ricerca:**

Chimica Computazionale

○ **Descrizione della ricerca in italiano (max 1000 caratteri):**

Proponiamo lo sviluppo, progettazione e preparazione di molecole geneticamente codificabili la cui funzione possa venir manipolata otticamente. Per la progettazione si adotterà un approccio "bottom-up" basato su interruttori molecolari foto-modulabili inseriti in proteine con lo scopo di fornire componenti utili in biologia sintetica. [1,2] Più specificatamente, questi sistemi biomimetici sono costituiti da un cromoforo organico fotoisomerizzabile legato ad una proteina solubile. In particolare, utilizzeremo, come modello, un mutante della proteina CRABP-II [3,4] a cui si lega il retinale ed una metodologia computazionale automatica [5] al fine di individuare, sistematicamente varianti con desiderate caratteristiche fotochimiche. In prospettiva, con questi sistemi sarà possibile controllare otticamente l'interazione con bersagli molecolari e/o pathway biochimici. L' AdR richiesto supporterà la parte computazionale della ricerca richiedente sviluppo metodologico (WP2) e applicazione computazionale alla biologia sintetica (WP6).

Descrizione della ricerca in inglese (max 1000 caratteri):

We propose the development, design and preparation of genetically encodable, optically controlled molecules. For this purpose, we decided to adopt a bottom up approach to the engineering of protein-based molecular photoswitches aimed at broadening the toolbox of synthetic biology. [1,2] These will be elementary biomimetic systems featuring an organic chromophore covalently bound to a soluble protein. In particular, employing a mutant of CRABP-II [3,4] binding retinal as a model and relying on our recently developed automatic methodology [5] we aim at systematically identify variants displaying desired photochemical properties. The proposed approach may open up the path to the optically control of the interaction of such systems with selected molecular targets and/or biochemical pathways. The requested AdR will be supporting the computational part of the research via graduate research focused on the methodological development (WP2) and computational applications to synthetic biology (WP6)..

Attività affidate all'assegnista di ricerca: Sviluppo di metodologie computazionali (programmazione-software) e simulazioni di sistemi proteici e loro proprietà spettroscopiche e fotochimiche

○ **Sede dell'attività di ricerca:** DBCF

○ **Eventuale numero massimo di pubblicazioni da allegare alla domanda dell'assegnista:**

Responsabile scientifico dell'assegno di ricerca: Massimo Olivucci

Firma del Responsabile scientifico

A handwritten signature in black ink that reads "Massimo Olivucci". The signature is written in a cursive style with a large, prominent initial 'M'.