

**Titolo: STUDIO TEORICO E NUMERICO DELLE PROPRIETÀ DIFFUSIVE DI BIOMOLECOLE PER L'OSSERVABILITÀ SPERIMENTALE DI LORO INTERAZIONI A LUNGO RAGGIO**

Candidato: Matteo Gori

Relatore: Prof. Stefano Ruffo

Correlatore: Prof. Marco Pettini

Lo studio delle interazioni a lungo raggio fra le biomolecole, al fine di comprendere meglio come la materia vivente riesca ad esprimere a livello molecolare il suo elevatissimo grado di organizzazione dinamica, rimane ad oggi un campo in larghissima parte inesplorato. Recentemente questo tema di ricerca è stato ripreso sia sul piano teorico che su quello sperimentale da un gruppo misto di fisici e biologi del Centre de Physique Théorique (CPT) di Luminy (Marsiglia) e del Centre d'Immunologie Marseille Luminy (CIML) rispettivamente. Nonostante i risultati sperimentali finora ottenuti siano coerenti e di chiara lettura fisica, manca ad oggi una conferma teorico/computazionale di alcune misure ed una validazione teorica di una vantaggiosa metodica sperimentale utilizzata che fa uso di "traccianti passivi" per cui, in una soluzione elettrolitica, i cambiamenti della dinamica diffusiva di biomolecole interagenti fra loro vengono rilevati attraverso le proprietà diffusive di particelle fluorescenti inerti o debolmente interagenti fra loro e con le biomolecole. Inoltre, rimane aperta la ricerca di nuove osservabili sperimentali, indipendenti dalla misura del coefficiente di self-diffusione, che offrano la possibilità di un controllo incrociato con i risultati attualmente a disposizione, permettendo di escludere la possibilità che questi siano dovuti ad artefatti sperimentali piuttosto che alla presenza di interazioni deterministiche fra le biomolecole. In questo contesto si inserisce il presente lavoro di tesi, che ha affrontato, dal punto di vista teorico e numerico il problema di caratterizzare la dinamica e la diffusione di una o più popolazioni di particelle browniane interagenti. Il nostro lavoro ha riguardato vari aspetti:

- abbiamo elaborato un modello teorico della diffusione di traccianti non interagenti in soluzione ed in presenza di ostacoli circostanti anch'essi soggetti a diffusione e mutuamente interagenti - ovvero le biomolecole - poichè in letteratura non esiste alcun risultato che possa essere applicato al caso oggetto dei nostri studi. A partire dal formalismo del Continuous Time Random Walk (CTRW), dopo aver provveduto ad una generalizzazione del cosiddetto "velocity model" a 3 dimensioni e verificando la consistenza, abbiamo ricavato un'espressione esplicita per il coefficiente di diffusione di traccianti passivi in presenza di biomolecole circostanti interagenti;
- abbiamo sviluppato *ab ovo* un programma di simulazione numerica di dinamica molecolare di una o più popolazioni di particelle presenti al contempo in una soluzione elettrolitica e interagenti mediante interazioni a corto e lungo raggio anche selettive. In questo modo è stato possibile validare numericamente la tecnica dei traccianti passivi e calcolato un'indice di complessità  $K_\sigma$  che rappresenta una generalizzazione del massimo esponente di Lyapunov che abbiamo adattato al nostro caso. I risultati ottenuti validano l'impiego di una tecnica sperimentale, che, a priori, è capace di individuare l'effettiva presenza di interazioni deterministiche a lungo raggio e di escludere la presenza di artefatti sperimentali dietro i risultati sulle misure di self-diffusione.