

**DIPARTIMENTO DI FISICA**  
**CONSIGLIO DI DIPARTIMENTO DEL 27 MAGGIO 2014**

VERBALE N. 10/2014

Il giorno 27 maggio 2014, alle ore 15.30, presso la sala Consiglio del Dipartimento di Fisica - Cittadella Universitaria di Monserrato, si è riunito il Consiglio di Dipartimento di Fisica, convocato e presieduto dal Direttore Prof. Luciano Colombo per discutere il seguente Ordine del Giorno:

**Seduta plenaria**

1. Comunicazioni:
  - o del Direttore
  - o del rappresentante del Dipartimento in S.A.
2. Approvazione del verbale del Consiglio di Dipartimento del 28.04.2014
3. Ratifica Disposizioni del Direttore
4. Variazioni di budget
5. Delibera in merito alla proposta del prof. P. Randaccio di cessione di un drone al C.G.S.
6. Rinnovo assegno di ricerca del dott. Susruta Samanta: relatore P. Ruggerone
7. Selezione proposte per Bando VP 2014-2015
8. Varie ed eventuali

**Seduta riservata ai Professori di I e II fascia**

9. Richiesta di afferenza al Dip.to Fisica del prof. Mariano Casu
10. Discussione preliminare sulla richiesta di nominativi per commissioni di concorso per no.3 posti di professore II fascia

**Seduta riservata ai Professori di I fascia**

11. Discussione preliminare sulla richiesta di nominativi per commissioni di concorso per no.1 posto di professore I fascia

Il Consiglio di Dipartimento è così composto:

**Professori di I fascia:**

|                        |                           |
|------------------------|---------------------------|
| Prof. Anedda Alberto   | Assente Giustificato      |
| Prof. Casula Francesco | Presente                  |
| Prof. Colombo Luciano  | Presente                  |
| Prof. D'Amico Nicolo'  | Assente Giustificato      |
| Prof. Puddu Giovanna   | Presente (dalle h. 16.13) |
| Prof. Saitta Biagio    | Assente Giustificato      |

**Professori di II fascia:**

|                            |                           |
|----------------------------|---------------------------|
| Prof. Bongiovanni Gianni   | Presente                  |
| Prof. Burderi Luciano      | Assente Giustificato      |
| Prof. Cadoni Mariano       | Assente Giustificato      |
| Prof. Cappellini Giancarlo | Assente Giustificato      |
| Prof. Ceccarelli Matteo    | Presente                  |
| Prof. Concas Giorgio       | Presente                  |
| Prof. Devoto Alberto       | Presente                  |
| Prof. Fiorentini Vincenzo  | Assente Giustificato      |
| Prof. Ledda Francesco      | Assente Giustificato      |
| Prof. Mezzorani Giuseppe   | Assente                   |
| Prof. Mura Andrea          | Presente                  |
| Prof. Randaccio Paolo      | Presente                  |
| Prof. Ruggerone Paolo      | Presente                  |
| Prof. Usai Gianluca        | Presente (dalle h. 16.28) |

**Ricercatori**

|                     |          |
|---------------------|----------|
| Dr Bernardini Fabio | Presente |
|---------------------|----------|

## DIPARTIMENTO DI FISICA

|                                   |                      |
|-----------------------------------|----------------------|
| Dr. Bosin Andrea                  | Assente Giustificato |
| Dr Carbonaro Carlo Maria          | Presente             |
| Dr Chiriu Daniele                 | Assente Giustificato |
| Dr Congiu Francesco               | Assente Giustificato |
| Dr Corpino Riccardo               | Presente             |
| Dr D'Alesio Umberto               | Assente Giustificato |
| Dr D'Apollonio Giuseppe           | Assente Giustificato |
| Dr De Falco Alessandro            | Assente Giustificato |
| Dott.ssa Fanti Viviana            | Presente             |
| Dott.ssa Geddo Lehmann Alessandra | Assente Giustificato |
| Dott. Mallocci Giuliano           | Presente             |
| Dott.ssa Manca Giulia             | Assente Giustificato |
| Dr. Melis Claudio                 | Assente Giustificato |
| Dr Mula Guido                     | Presente             |
| Dr Oldeman Rudolf                 | Presente             |
| Dr. Quochi Francesco              | Presente             |
| Dr. Ricci Pier Carlo              | Assente Giustificato |
| Dr. Riggio Alessandro             | Assente Giustificato |
| Dr Saba Michele                   | Presente             |
| Dr Salis Marcello                 | Presente             |
| Dr.ssa Satta Loredana             | Assente Giustificato |
| Dr. Vargiu Attilio Vittorio       | Presente             |

### **Rappresentanti del personale tecnico-amministrativo:**

|                                |          |
|--------------------------------|----------|
| Dott.ssa Bernardini Alessandra | Presente |
| Dott.ssa Marongiu Fernanda     | Presente |
| Sig. Melis Luigi               | Presente |
| Sig. Sirigu Ignazio            | Presente |

### **Rappresentante degli studenti iscritti al Dottorato di Ricerca:**

|                         |                      |
|-------------------------|----------------------|
| Dr.ssa Acosta Silvia    | Presente             |
| Dr. Cardia Roberto      | Presente             |
| Dr.ssa Cogoni Violetta  | Presente             |
| Dr. D'Agostino Tommaso  | Assente Giustificato |
| Dr. Daddi Gianluca      | Presente             |
| Dr. Flore Walter        | Presente             |
| Dr. Franzin Edgardo     | Assente Giustificato |
| Dr.ssa Maccioni Barbara | Assente              |
| Dr.ssa Vacca Claudia    | Presente             |

Il Consiglio è presieduto dal Prof. Luciano Colombo, Direttore del Dipartimento.

Verbalizza la dott.ssa Fernanda Marongiu

Il Presidente, verificato il numero legale, provvede alla lettura dell'Ordine del Giorno

### **Seduta plenaria**

#### **1. Comunicazioni:**

##### **o del Direttore**

1. Il Direttore dà il benvenuto ai nuovi rappresentanti degli Assegnisti, Dottorandi e Specializzandi e augura loro buon lavoro;
2. Il Direttore comunica che a decorrere dal 01/08/2015 la Dott.ssa Loredana Satta cessa dal servizio;
3. Il Direttore ricorda che il 02/06 è la festa della Repubblica e pertanto il Dipartimento sarà chiuso al pubblico;
4. Il Direttore comunica che ha ricevuto dal Presidente della Facoltà di Scienze una lettera dell'ANVUR relativa all'avvio della fase sperimentale dei nuovi adempimenti col sistema AVA;
5. Il Direttore informa che il 28/05 si terrà l'assemblea nazionale di CON.SCIENZE;

6. Il Direttore avvisa che per il 10/06/2014 convocherà un Consiglio di Dipartimento riservato ai docenti di I e II fascia.

- o ***del rappresentante del Dipartimento in S.A.***

Non ci sono comunicazioni

**2. Approvazione del verbale del Consiglio di Dipartimento del 28.04.2014**

Il Direttore porta all'attenzione del Consiglio il verbale della seduta del 28/04/2014.

Il Consiglio approva all'unanimità.

**3. Ratifica Disposizioni del Direttore**

Il Direttore porta a ratifica del Consiglio le Disposizioni n. 104-105-116-117-118-121-125-128 del 2014.

Il Consiglio ratifica all'unanimità le disposizioni elencate.

**4. Variazioni di budget**

Il Direttore, coadiuvato dal Segretario Amministrativo, porta all'approvazione del Consiglio le seguenti variazioni di Budget per l'anno 2014:

**MAGGIORI RICAVI / MAGGIORI COSTI**

(Voce COAN Ricavi: A.01.01.02.01.01.01 – Voce COAN Costi: A.15.01.04.01.01.01)

Convenzioni Conto Terzi – Responsabile scientifico Prof. Randaccio:

Azienda Brotzu – fatt. n. 2/2014 - € 18.000,00 + IVA

Eurallumina - fatt. n. 4/2014 - € 1.000,00 + IVA

**MAGGIORI RICAVI / MAGGIORI COSTI**

(Voce COAN Ricavi: A.01.05.01.01.03.01 – Voce COAN Costi: A.15.01.04.04.01.01)

Tariffario Conto Terzi – Responsabile scientifico Prof. Randaccio:

SGS Italia – fatt. n. 1/2014 - € 50,00 + IVA;

Portovesme srl – fatt. n. 3/2014 - € 700,00 + IVA

**MAGGIORI RICAVI / MAGGIORI COSTI**

(Voce COAN Ricavi: A.01.02.027.01.01.01 – Voce COAN Costi: A.15.01.06.01.01.01)

Donazioni per congresso SiO2 – Responsabile scientifico Dr. Carbonaro

EDISES srl - € 250,00;

COHERENT DEUTSCHLAND GMBH - € 600,00;

LASER OPTRONIC SRL - € 500,00.

Il Consiglio approva all'unanimità.

**5. Delibera in merito alla proposta del prof. P. Randaccio di cessione di un drone al C.G.S.**

Il prof. Randaccio espone brevemente la richiesta di proporre al Centro Grandi Strumenti la cessione, in comodato gratuito e per la durata di un anno, di un drone acquistato dal dipartimento, dandone opportune motivazioni.

Dopo breve discussione, il Consiglio esprime parere favorevole alla richiesta del Prof. Randaccio, e dà mandato al direttore e al Segretario amministrativo di curare la pratica.

**6. Rinnovo assegno di ricerca del dott. Susruta Samanta: relatore P. Ruggerone**

Il Prof. Ruggerone, in qualità di responsabile scientifico, riferisce in Consiglio sull'attività dell'assegnista Dott. Susruta Samanta di cui presenta la relazione:

***Computational study of permeability mechanisms in bacterial membranes***

*The goal of the research was the study of the permeability of the membrane of Gram-Negative bacteria, associated with the expression of porins, to beta-lactams and selected fragments. During the first year, the activity was focused on three substrate specific porins from gram negative bacteria Pseudomonas aeruginosa e.g., OprD, OccK8 and OccK10. The goal was set to, 1) understand the structure and dynamics of these porins, 2) understand the transport properties through these porins, and finally 3) to set up rules for better permeability of antibiotics. We simulated, by using metadynamics and other related algorithms (well tempered metadynamics and multiple-walkers metadynamics), the diffusion of some beta-lactam antibiotics and some natural substrates, used by bacteria as nutrients.*

*To simulate the experimental electrophysiology technique, we implemented an algorithm to apply a constant electric field along the pore and investigate the ionic current. The identification of two substates, respectively open and a closed state, was correlated to the dynamics of one extracellular loop, L2, that can interact with the eyelet region, a key player for the translocation of molecules through OprD. Simulations were performed at several different chemical conditions (pH, salt concentration, mutations). The results from the computational studies were found to be in good agreement with the experimental work done by our collaborators.*

*In the next phase, translocation of four charged residues (i.e., arginine, benzoate, lysine and ornithine) through OprD was studied using Metadynamics. It was found out that the presence of a negatively charged pocket just above the constriction region helps positively charged substrates to bind. It was also found out that the presence of a 'basic ladder', consisting of arginine and lysine residues, helps negatively charged residues to translocate through OprD by consecutive interactions.*

*To understand the translocation of antibiotics through OprD, two carbapenem molecules (imipenem and meropenem) were chosen. Carbapenems are a class of beta-lactam antibiotics with excellent activity against Pseudomonas aeruginosa. However, there is little direct evidence for a specific binding-site for carbapenems within these channels. Metadynamics methods were used to reconstruct the free energy surfaces for translocation of substrates through OprD. In agreement with the experiments, the barrier of translocation for imipenem (13.4 kcal/mol) was found to be lower than that of meropenem (19.4 kcal/mol). The mechanism of translocation of imipenem and meropenem was understood. It was found out that the zwitterionic structure of the antibiotics plays significant role in translocation of antibiotics. A strong binding site for imipenem was identified in OprD. The specific charge separation in imipenem helps it to bind at the affinity site. Buried nature of the positive charge in meropenem restricts it from binding in the negatively charged pocket. It was also found out that the path of translocation has major effect on the barrier for translocation. If a substrate fails to bind in the affinity site in OprD, it results in very high barrier for translocation.*

*Also in the case of OccK8 and OccK10 the barrier for translocation was found to be lower for imipenem (7.4 kcal/mol in OccK8 and 7.2 kcal/mol in OccK10) than that of meropenem (11.0 kcal/mol in OccK8 and 20.9 kcal/mol in OccK10). Also in this case the 'basic ladder' and*

*presence of negative pocket above the constriction region was found to be favorable to bind for zwitterionic molecules. Consecutive interaction of the negative part of the substrates with the basic ladder was found to be the driving mechanism of translocation through OccK8 and OccK10.*

*The mechanism of translocation of our members of the cephalosporin family (ceftobiprole, cefepime, cefotaxime, ceftazidime) through OccK8 was also studied. The barrier of translocation for the zwitterionic antibiotics (11.1 kcal/mol for ceftobiprole and 16.3 kcal/mol for cefepime) were found out to be lower than the negatively charged antibiotics (22.6 kcal/mol for cefotaxime and no translocation for ceftazidime within 500ns). Further studies on the cephalosporins are underway.*

*In conclusion, in last one year the structure and dynamics of three representative members of the substrate specific porins of gram negative bacteria Pseudomonas aeruginosa was understood. The mechanism of translocation through them were also proposed. The computational findings are in good agreement with the available experimental results. However, the effect of mutations to facilitate translocation is in progress. We also plan to use advanced simulation techniques (e.g., replica exchange and bias exchange simulations) for even better understanding of the dynamics of the flexible loops in these porins.*

**Publications:**

1. *Interaction of Curcumin with PEO-PPO-PEO Triblock Copolymers: A Molecular Dynamics Study, S. Samanta & D. Roccatano\*, Journal of Physical Chemistry B, 2013, 117, 3250.*
2. *Computational Study of Permeability Mechanisms of Carbapenems through OprD, S. Samanta & M. Ceccarelli\*, (manuscript in preparation).*
3. *Computational Study of Permeability Mechanisms of Antibiotics through OccK8 and OccK10, S. Samanta & M. Ceccarelli\*, (manuscript in preparation).*

**Poster presentations:**

1. *"58th Biophysical Conference, San Francisco, USA. Organizer: Biophysical Society (February, 2014)*
2. *"541. WE-Heraeus-Seminar" Transport through Nanopores. Organizer: Jacobs University Bremen (August, 2013).*

Successivamente, il prof. Ruggerone esprime il seguente giudizio:

Il giudizio sul candidato è positivo. A parte un primo periodo contraddistinto da problemi burocratici e da una fase di conoscenza del progetto, ha sostanzialmente portato a termine quelle che erano le attività previste per il primo anno di lavoro (che termina ai primi di luglio), cioè caratterizzare con simulazioni le proprietà di trasporto del canale OprD. Sono stati studiati alcuni substrati naturali, usati come nutrienti dai batteri, e una serie di antibiotici comunemente usati negli ospedali per le infezioni più gravi. Combinando le simulazioni con i dati sperimentali dei nostri partner, principalmente i biofisici di Brema, abbiamo iniziato a identificare qualche semplice regola fisico/chimica capace di modulare il trasporto di molecole lungo questo canale, basate sulla basicità della catena laterale e la flessibilità. Nell'immediato ci proponiamo di testare e verificare queste due proprietà con altre molecole. Mi aspetto una più forte interazione con i colleghi di Brema, con un coinvolgimento maggiore del candidato, per poter concludere questa parte con almeno 2 lavori da sottoporre a riviste scientifiche con referee.

Inoltre, in questo primo anno sono già stati fatti degli studi preliminari su un'altra famiglia di canali. Grazie a un progetto "PRACE preparatory" abbiamo testato degli algoritmi misti

MC/MD (bias exchange metadynamics e parallel tempering) e abbiamo inoltrato una richiesta per un elevato numero di ore per estendere le simulazioni fatte sino ad oggi ed avere in tempi più brevi risultati significativi da un punto di vista statistico. Stiamo inoltre aspettando alcune informazioni dai partner su quali sono i canali più espressi nei batteri e su cui c'è più interesse a focalizzare il lavoro.

Per i motivi sopra esposti propone al Consiglio di Dipartimento il rinnovo dell'assegno di ricerca per un ulteriore anno.

Il Consiglio, dopo breve discussione, approva unanime e seduta stante la relazione finale e il rinnovo dell'assegno di ricerca per altri dodici mesi al Dr. Samanta, dando mandato al Segretario Amministrativo di effettuare le variazioni di budget necessarie.

**7. Selezione proposte per Bando VP 2014-2015**

Il Direttore ricorda al Consiglio che il Dipartimento ha a disposizione 3 long visits e 1 short visit nell'ambito del bando per i Visiting Professors.

Riferisce di aver ricevuto 4 proposte così articolate:

- 3 long visits (1 presentata dal prof. Ceccarelli e 2 presentate dal Dr. Vargiu);
- 1 short visit (presentata dal prof. Ruggerone)

Fa notare che le proposte coincidono perfettamente con le possibilità a disposizione, quindi ne propone l'approvazione.

Dopo breve discussione, il Consiglio approva all'unanimità e seduta stante le proposte per il bando Visiting Professor, così come elencate dal Direttore.

8. Varie ed eventuali

**Seduta riservata ai Professori di I e II fascia**

9. Richiesta di afferenza al Dip.to Fisica del prof. Mariano Casu

10. Discussione preliminare sulla richiesta di nominativi per commissioni di concorso per no.3 posti di professore II fascia

**Seduta riservata ai Professori di I fascia**

11. Discussione preliminare sulla richiesta di nominativi per commissioni di concorso per no.1 posto di professore I fascia

Non essendoci altro da discutere e deliberare, la seduta del Consiglio è tolta alle ore 16.50

Il Segretario Verbalizzante

Il Direttore del Dipartimento

Dott.ssa Fernanda Marongiu

Prof. Luciano Colombo