

## Assegnamento dello spettro NMR dell'Anidrasi Carbonica II nella forma Zn(II) e Co(II) sostituita

Le metallo-proteine costituiscono una classe di proteine caratterizzate dalla presenza di uno ione metallico coordinato da leganti proteici all'interno di una cavità creata dall'avvolgimento polipeptidico. L'interesse per le loro proprietà strutturali è ampio, vista l'interconnessione che c'è fra queste e la loro funzione biologica, e la spettroscopia di risonanza magnetica nucleare (NMR) è una tecnica particolarmente adatta al loro studio.

Lo scopo di questo lavoro è stato lo studio dell'anidrasi carbonica II umana (hCAII) nella forma Zn(II) e Co(II) sostituita tramite la spettroscopia NMR in soluzione. I segnali del *backbone* della hCAII nella forma Zn(II) sostituita sono stati assegnati tramite l'uso di spettri NMR in tripla risonanza, che hanno permesso di identificare l'84% degli amminoacidi.

Successivamente, lo Zn(II) è stato sostituito con Co(II) e l'assegnamento è stato trasferito a questa nuova forma. Sono state quindi studiate le proprietà dello ione paramagnetico in assenza e in presenza di un inibitore dell'enzima ( $C_2H_2O_4$ ). I tensori dell'anisotropia della suscettività magnetica del Co(II) calcolati nei due casi sono stati così confrontati. Dal calcolo tensoriale è stato possibile constatare come le componenti assiale e rombica del tensore della proteina con inibitore siano il triplo rispetto all'altro caso e gli assi Z dei due tensori siano ruotati di circa  $50^\circ$  l'uno rispetto all'altro. L'analisi delle variazioni di *chemical shift* dei segnali e dell'accoppiamento dipolare indotti dalla presenza dello ione metallico nei due casi ha fornito utili informazioni strutturali sull'enzima e dettagli sul suo sito attivo.

**Candidato:** Tommaso Staderini

**Relatore:** Roberta Pierattelli

email: pierattelli@cerm.unifi.it

**Correlatore:** Linda Cerofolini

email: cerofolini@cerm.unifi.it