

Structural investigations in the colloidal domain: proteins in solution and self-assembled nanoaggregates

Alessandra Del Giudice

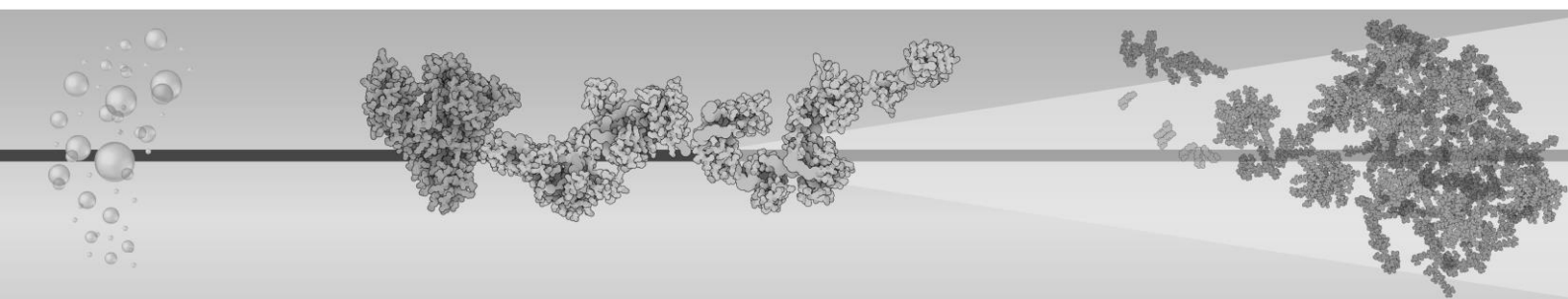
Understanding the structure of molecular systems and its transformations allows us to explain complex processes and correlate structure to function. At the intermediate length scale between typical atomic distances within a molecule and macroscopic sizes of materials (1-100 nm) interesting phenomena occur guided by intermolecular interactions and on energetic scales comparable with thermal fluctuations: we are in the “colloidal” and “soft matter” domain, to which many familiar systems belong, including everyday use formulations and the molecular constituents of life.

Small angle X-ray scattering (SAXS) can be a valuable tool to study the structure of such systems and the changes occurring as a function of stimuli and perturbations, thanks to the macroscopically representative structural insight on an extended interval of length scales and the applicability in conditions that can be close to the functional state or modified in a controlled way to study structural responses.

In the case of biological macromolecules and particularly for proteins, SAXS can monitor phenomena like conformational variations and complex formation, possibly implicated in physiologically important mechanisms.

Considering smaller building blocks, SAXS can “see” self-assembly phenomena of amphiphilic molecules in supramolecular aggregates, and help understanding their variability as a function of several parameters, given the multiplex nature of the involved interactions.

In this context, examples of structural investigations in solution will be shown. We will focus on the conformational changes of albumin, the most abundant transporter protein of body fluids, and on the phenomenon of coacervate formation in mixtures of oppositely charged amphiphiles and polymers.



Indagini strutturali nel dominio colloidale: proteine in soluzione e nanoaggregati autoassemblati

Alessandra Del Giudice

Comprendere la struttura dei sistemi molecolari e le loro trasformazioni permette di spiegare processi complessi e di correlare la struttura alla funzione. Nella scala intermedia di lunghezza compresa tra le distanze atomiche tipiche all'interno di una molecola e le dimensioni macroscopiche dei materiali (1-100 nm), si manifestano fenomeni interessanti guidati dalle interazioni intermolecolari e su scale energetiche comparabili con le fluttuazioni termiche: ci troviamo nel dominio della “materia soffice” e dei “colloidi”, cui appartengono molti sistemi di uso comune, incluse formulazioni di uso quotidiano e i costituenti molecolari della vita.

La tecnica di *scattering* di raggi X a basso angolo (*Small Angle X-ray Scattering*, SAXS) si rivela un valido strumento per studiare la struttura di tali sistemi e le variazioni che avvengono in risposta a stimoli e perturbazioni, grazie alla capacità di fornire informazioni strutturali mediate su un ampio intervallo di scale di lunghezza e alla possibilità di operare in condizioni vicine allo stato funzionale o opportunamente modificate per studiare le risposte strutturali.

Nel caso delle macromolecole biologiche, e in particolare delle proteine, si possono monitorare processi come le variazioni conformazionali e la formazione di complessi, spesso implicati in meccanismi di rilevanza fisiologica.

Se si considerano blocchi costitutivi più piccoli, si possono studiare fenomeni di autoassociazione di molecole anfifile in aggregati supramolecolari e separazioni di fase, contribuendo alla comprensione della loro variabilità in funzione di diversi parametri, data la natura multifattoriale delle interazioni coinvolte.

In questo contesto, verranno presentati esempi di indagini strutturali in soluzione, con un focus sulle variazioni conformazionali dell'albumina, la principale proteina di trasporto nei fluidi corporei, e sul fenomeno della formazione di coacervati in miscele di surfattanti e polimeri di carica opposta.

