

# CONFERENCE ON THE COMPLEX INTERACTIONS OF LIGHT AND BIOLOGICAL MATTER: EXPERIMENTS MEET THEORY

**Luca Grisanti<sup>a</sup>, Anna Painelli<sup>b</sup>**

<sup>a</sup>*Scuola Internazionale Superiore di Studi Avanzati (SISSA), Trieste*

<sup>b</sup>*Dipartimento di Scienze Chimiche, della Vita e della Sostenibilità Ambientale, Università degli Studi di Parma*

*Sommario del congresso tenutosi a Trieste sull'interazione tra radiazione e materia biologica, incentrato sulla interdisciplinarietà e la commistione di competenze teorico-modellistiche e sperimentali.*

La prima edizione della conferenza internazionale "Conference on the Complex Interactions of Light and Biological Matter: Experiments meet Theory" si è tenuta a Trieste presso l'International Center for Theoretical Physics (ICTP) (<http://indico.ictp.it/event/8293/>).

La conferenza è stata organizzata allo scopo di far incontrare esperti internazionali nei campi della biochimica, della chimica e della fisica per discutere in un ambiente collaborativo dell'interazione tra luce e la materia biologica ed i suoi costituenti fondamentali. Studi teorici e sperimentali rivolti alla fotofisica e fotochimica di sistemi di interesse biologico sono stati presentati ad una platea varia e molto attenta, con ampi spazi di discussione. L'idea è stata quella di avvicinare e far colloquiare ricercatori con un ampio spettro di competenze diverse ma accomunati dall'interesse verso la molteplicità di fenomeni e processi fondamentali che governano l'interazione tra la radiazione elettromagnetica e la materia organica che costituisce il mondo vivente.

Questa conferenza nasce da contatti e collaborazioni attive tra il gruppo di "Scienza dei Materiali Computazionale" della sezione di Fisica Statistica e della Materia Condensata (CMSP) dell'ICTP ed in

particolare il Dr. Hassanali, il gruppo della Prof.ssa Anna Painelli dell'Università di Parma, che si occupa sia di modellizzazione teorica e di misure nell'ambito della spettroscopia molecolare, e il gruppo della Prof.ssa Gabi Kaminski dell'Università di Cambridge, attivo soprattutto in biofisica sperimentale.

La conferenza ha inteso sviluppare i seguenti ambiti:

- avanzamenti teorici nella modellizzazione di stati elettronici eccitati in sistemi di rilevanza biologica, inclusi processi di trasferimento di carica ed energia;
- fotofisica e fotochimica della materia soffice attraverso tecniche spettroscopiche risolte in tempo;
- sviluppi ed applicazioni avanzate di tecniche ottiche lineari e non-lineari per l'*imaging* di cellule e tessuti;
- nuovi fenomeni di fluorescenza e luminescenza in proteine e sistemi biologici.

Le diverse competenze e il differente rapporto di attività di ricerca sperimentale e/o teorica che caratterizza l'attività di ricerca degli organizzatori hanno certamente contribuito a creare un



interessante terreno fertile per lo scambio e il confronto, garantendo una molteplice varietà di argomenti e tematiche, tutti però collegati dal filo rosso dell'interazione fra la radiazione e la materia biologica. Oltre alla varietà sotto il profilo scientifico, i contributi apportati dai diversi partecipanti hanno anche implicato un'importante diversità di background geografico-culturali ed umani. Grazie alla vocazione dell'ICTP verso la promozione della cultura scientifica e delle scienze fisiche in particolare nei paesi in via di sviluppo, è stato possibile coinvolgere anche partecipanti da diversi istituti ed università sparsi per il globo. In particolare, circa il 30% dei partecipanti proveniva da regioni diverse da Europa e Nord America. La presenza femminile, particolarmente rilevante in questi ambiti e dunque correttamente rappresentata, ha visto la partecipazione di una componente femminile pari al 47% dei partecipanti. La dimensione del meeting, con circa 60 partecipanti, si è rivelata ideale: sufficiente a mantenere un acceso dibattito e una costante partecipazione, senza perdere i vantaggi di una situazione raccolta e prolifica dal punto di vista della discussione scientifica. Notevolmente positivo il feedback espresso da molti dei partecipanti, ed estremamente positive anche le interazioni tra gli stessi, sia a seguito delle presentazioni, nelle sessioni di domande, nelle sessioni poster e nei coffee break.



*Foto di gruppo della "Conference on the Complex Interactions of Light and Biological Matter: Experiments meet Theory". La foto è stata scattata nella terrazza dell'Adriatico Guesthouse dell'ICTP*

La conferenza è stata strutturata su 5 mattine e 3 pomeriggi, suddivisa in 20 contributi orali di tipo "invited" (della durata di 40+10') e 16 contributi orali "volontari" (della durata di 25+5'), oltre ad una sessione di presentazioni poster. Le presentazioni sono state raggruppate secondo argomenti in sessioni, che qui riportiamo anche per offrire una panoramica degli argomenti toccati, ed alcuni tra i nomi fra gli invited:

1. *Stati eccitati, fotofisica e dinamica di piccole molecole biologiche.* In questa sessione segnaliamo i contributi di: Ivano Tavernelli (IBM, Zurigo) "New strategies for non-adiabatic dynamics with trajectories"; di Fabrizio Santoro (ICCOM-CNR, Pisa) "Nonadiabatic decay of photoexcited nucleobases in water studied by mixed quantum/classical dynamical approaches", Nadia Rega (Università di Napoli) "Exploring nuclear photorelaxation through an integrated ab-initio molecular dynamics and time resolved vibrational analysis approach" e Nadia Doslic (Ruder Boskovic Institute, Zagabria, Croazia) "Excited state proton transfer in systems of chemical and biological interest";

2. *Spettroscopie avanzate lineari e non-lineari per sistemi biologici*. Tra cui i contributi di Isabella Daidone (Università dell'Aquila) "In silico time-resolved infrared spectroscopy of biomolecules in solution" e Barbara Rossi (Elettra-Sincrotrone, Trieste) "Tunable UV resonant raman spectroscopy at Elettra: a tool for exploring the structural dynamics in biological matter";
3. *Imaging di materia biologica, cellule, tessuti*. In particolare, Nadia Barbero (Università di Torino) ha contribuito con "Organic and hybrid photosensitizers for photodynamic therapy and imaging";
4. *Fluorescenza e fenomeni emergenti della materia biologica*. Steven Boxer (Stanford University, USA) ha in questa sessione eccellentemente presentato "GFP: a model system for understanding proton transfer, photoisomerization and optogenetics";
5. *Materiali bio-funzionali, sistemi viventi complessi ed interazione con la luce*. Importanti i contributi in questa sessione, con Nora Ventosa (ICMAB-CSIC, Barcellona, Spagna) "Design of tailored fluorescent colloidal probes using thermodynamically stable nanovesicles as scaffolds" e Ehud Gazit (Tel Aviv University) con "Molecular-self-assembly of peptides, peptide nucleic acids and metabolites into optically active assemblies";
6. Fotochimica nella materia biologica e suoi costituenti fondamentali. Con gli importanti contributi di Wolfgang Domcke (Technical University of Munich, Germania) "Mechanistic aspects of solar energy harvesting with organic heterocycles", uno dei padri della fotochimica;
7. Comportamenti eccitonici, trasferimento di carica ed energia nei sistemi biologici. Una ricca sessione, fra cui i contributi di Benedetta Mennucci (Università di Pisa) "Excitonic interactions in biological systems: from the understanding to manipulation", Roberto Improta (IBB-CNR, Napoli e Université Paris-Saclay, Francia) "Photoinduced charge transfer processes in oligonucleotides: from base pairs up to DNA duplexes", Ravindra Venkatramani (TIFR, Mumbai, India) "Photoinduced charge transfer transitions in charged amino acids: New label free spectroscopic markers to probe protein structure and dynamic" e Modulating the charge recombination to DNA" di Mahesh Hariharan (IISER, Kerala, India).

L'ICTP è un importante istituto di fisica teorica che non solo organizza annualmente oltre 60 fra congressi, scuole e workshop internazionali all'avanguardia della ricerca scientifica mondiale, che contribuiscono a garantire allo staff scientifico dell'ICTP, ai ricercatori associati, ai borsisti e corsisti l'accesso ad un largo spettro di opportunità di ricerca, ma coordina anche importanti programmi quali: il percorso di studio annuale a livello di pre-dottorato e noto come "Postgraduate Diploma Programme" che permette ai giovani scienziati dei Paesi in via di sviluppo di aspirare a competere per un posto nelle migliori università internazionali per il Ph.D; e il programma noto come "Associateship Scheme", istituito nel 1964, che promuove la formazione e il supporto alla carriera per i ricercatori membri dei Paesi in via di sviluppo.

Un istituto prestigioso che da oltre 50 anni rappresenta una forza trainante nell'ambito degli sforzi compiuti a livello globale per l'avanzamento scientifico. Fondato nel 1964 dal premio Nobel Abdus Salam, l'ICTP persegue il suo mandato assicurando agli scienziati dei Paesi in via di sviluppo un aggiornamento costante e mettendoli in grado di avere una carriera lunga e produttiva. Una location forse inusuale per un chimico, ma istituto di tutto rilievo nel campo della fisica, nonché di alto rilievo anche per la storia della chimica e scienza dei materiali computazionale, considerato che ha ospitato scienziati come Roberto Car e Michele Parrinello e ancora oggi ospita ricercatori impegnati nello sviluppo di codici quali *Quantum Espresso*.