

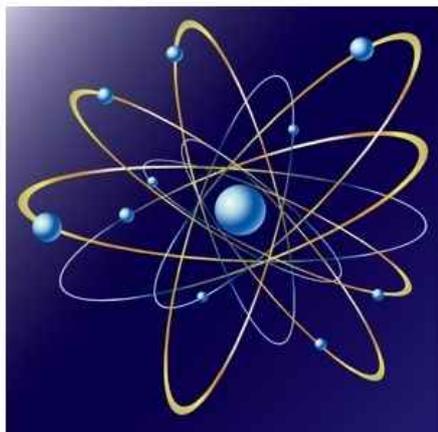


HOME NEWS METEO NOWCASTING GEO-VULCANOLOGIA ASTRONOMIA MEDICINA & SALUTE TECNOLOGIA VIAGGI OLTRE
LA
SCIENZA
FOTO VIDEO

Riconoscersi e scegliersi: svelato il "rendez-vous molecolare"

Qualcuno ha scritto che "incontrarsi, riconoscersi, scegliersi? questo è il senso della vita." E lo è sicuramente anche a livello molecolare

A cura di **Antonella Petris**
20 marzo 2017 - 17:49

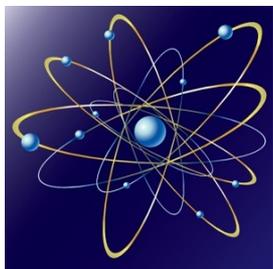


Qualcuno ha scritto che "incontrarsi, riconoscersi, scegliersi? questo è il senso della vita." E lo è sicuramente anche a livello molecolare. Secondo uno Studio pubblicato in questi giorni sulla rivista scientifica "Structure", un gruppo di ricercatori dell'Università di Padova ha messo a punto una tecnica computazionale in grado di osservare possibili cammini di incontro tra oggetti molecolari che conducono a questo fondamentale "rendez-vous molecolare". Il riconoscimento molecolare è uno dei più importanti processi di comunicazione che ha accompagnato sul piano evolutivo la trasformazione di forme di vita più semplici a sistemi organizzati più complessi.

"Facendo un parallelismo tra il mondo molecolare e la vita di tutti i giorni - spiega Stefano Moro, della Sezione di Modellistica Molecolare del Dipartimento di Scienze del Farmaco dell'Università di Padova - potremmo definire il riconoscimento molecolare come il linguaggio utilizzato dagli esseri umani, e le interazioni chimiche che lo caratterizzano come l'alfabeto alla base del linguaggio stesso. Ed in maniera ancora affascinante ad ogni riconoscimento consegue una scelta, così come al riconoscimento tra due o più oggetti molecolari associamo una funzione. Perciò è comprensibile intuire l'importanza attribuita all'identificazione di questi meccanismi e il perché rappresentino uno dei campi di ricerca in ambito più investigati". Tra le tecniche più importanti finora usate in questo ambito di Studio ci sono la cristallografia a raggi X, la risonanza magnetica nucleare e la microscopia elettronica. Si tratta comunque di tecniche strumentali che consentono di conoscere i dettagli relativi alla struttura dei diversi oggetti molecolari, ma ancora non è noto quali siano le modalità attraverso le quali essi si incontrano, si riconoscono e si scelgono.

Riconoscersi e scegliersi: svelato il "rendez-vous molecolare"

Qualcuno ha scritto che "incontrarsi, riconoscersi, scegliersi? questo è il senso della vita." E lo è sicuramente anche a livello molecolare. Secondo uno



Studio pubblicato in questi giorni sulla rivista scientifica "Structure", un gruppo di ricercatori dell'Università di Padova ha messo a punto una tecnica computazionale in grado di osservare possibili cammini di incontro

tra oggetti molecolari che conducono a questo fondamentale "rendez-vous molecolare". Il riconoscimento molecolare è uno dei più importanti processi di comunicazione che ha accompagnato sul piano evolutivo la trasformazione di forme di vita più semplici a sistemi organizzati più complessi.

"Facendo un parallelismo tra il mondo molecolare e la vita di tutti i giorni – spiega [Stefano Moro](#), della Sezione di Modellistica Molecolare del Dipartimento di Scienze del Farmaco dell'Università di Padova – potremmo definire il riconoscimento molecolare come il linguaggio utilizzato dagli esseri umani, e le interazioni chimiche che lo caratterizzano come l'alfabeto alla base del linguaggio stesso. Ed in maniera ancora affascinante ad ogni riconoscimento consegue una scelta, così come al riconoscimento tra due o più oggetti molecolari associamo una funzione. Perciò è comprensibile intuire l'importanza attribuita all'identificazione di questi meccanismi e il perché rappresentino uno dei campi di ricerca in ambito più investigati". Tra le tecniche più importanti finora usate in questo ambito di Studio ci sono la cristallografia a raggi X, la risonanza magnetica nucleare e la microscopia elettronica. Si tratta comunque di tecniche strumentali che consentono di conoscere i dettagli relativi alla struttura dei diversi oggetti molecolari, ma ancora non è noto quali siano le modalità attraverso le quali essi si incontrano, si riconoscono e si scelgono.

Lo Studio padovano ha tentato di riprodurre nella maniera più accurata possibile questo processo di

riconoscimento molecolare, attraverso processi di simulazione computerizzata. Il paradosso è che per poter esplorare eventi molecolari che avvengono in tempi brevissimi, nell'ordine dei microsecondi (tempo pari ad un milionesimo di secondo), è necessario effettuare simulazioni che richiedono tempi estremamente lunghi (settimane o mesi) e con infrastrutture per il calcolo scientifico molto importanti. In particolare, i sistemi analizzati quali sono proteine e peptidi sono costituiti da un numero di atomi molto elevato, e ciò comporta un considerevole sforzo computazionale per l'analisi nel tempo delle loro interazioni. In questo Studio è stato possibile riprodurre, sotto forma di un filmato, l'intero processo attraverso il quale alcuni peptidi di interesse farmaceutico riconoscono le rispettive proteine bersaglio, senza avvalersi dell'utilizzo di importanti infrastrutture di calcolo. Verosimilmente, questo Studio può considerarsi come uno dei primi esempi noti fino ad oggi di simulazione del processo di riconoscimento tra sistemi così complessi.