



COMUNICATO STAMPA

SEMINARIO

Simulazioni ad alte prestazioni del movimento delle proteine, per la progettazione razionale di nuovi farmaci

Sala Conferenze – Sardegna Ricerche

Loc. Piscina Manna – edificio 2

09010 Pula (Cagliari)

04 maggio 2011 - dalle 11.00 alle 13.00

Pula, 02/05/2011

Mercoledì **4 maggio**, alle ore 11.00, presso la sala Conferenze di Sardegna Ricerche (edificio 2, Parco tecnologico di Pula), il **CRS4** organizza un seminario sulle “**Simulazioni ad alte prestazioni del movimento delle proteine, per la progettazione razionale di nuovi farmaci**”. Il relatore è Andrea Cristiani, ricercatore presso l’Università di Ginevra e di Padova, con il quale collaborano i ricercatori del settore Biomedico del CRS4.

Matteo Floris, ricercatore Bio e Chemoinformatico del settore Biomedico del Centro di ricerca sardo, in un articolo per Archimede Webzine, spiega: “Spesso si tende a pensare che le **proteine** siano "oggetti" statici e immutabili, ma in realtà sono "oggetti" plastici e **variabili**. Talvolta, la loro **forma cambia in risposta a stimoli esterni**: ad esempio, possono muoversi per accogliere una molecola di farmaco nel proprio corpo o per impedirne l’ingresso. Questa non-staticità delle proteine e le interazioni tra loro hanno importanti implicazioni nel processo di ricerca di nuovi farmaci. Le odierne tecniche sperimentali non sono in grado di "filmare molecolarmente" il movimento completo che porta una proteina da uno stato ad un altro. La stessa tecnica della cristallografia, permette solamente di studiare i possibili stati o le possibili posizioni che una proteina può assumere, ad esempio durante il legame con un farmaco. Ecco che, a questo punto, risulta fondamentale l’utilizzo delle **simulazioni al computer**, per riuscire a "visualizzare" i **movimenti delle proteine e il conseguente comportamento nei confronti dei farmaci**. Negli ultimi 30 anni abbiamo assistito allo sviluppo di tecniche computazionali molto complesse come la Dinamica Molecolare ad esempio, ossia quell’insieme di tecniche computazionali che studiano sistemi



COMUNICATO STAMPA

chimico-fisici a livello molecolare da un punto di vista dinamico. Le simulazioni effettuate sulla dinamica delle molecole, riproducono con ottima approssimazione, movimenti dell'ordine di poche decine di nanosecondi: più l'esperimento è lungo (in termini di nanosecondi) più accurata è la stima dei possibili movimenti della proteina. Questo tipo di calcolo però, è molto dispendioso dal punto di vista computazionale: può avvenire solo grazie all'uso di supercomputer costruiti appositamente per questi esperimenti, in alternativa, il ricercatore comune, dotato di strumentazione di medio livello, può effettuare simulazioni di pochissimi nanosecondi al giorno.

Grazie alla recente introduzione in ambito scientifico delle GPU (Graphics Processing Unit) è possibile far eseguire al computer, simulazioni più lunghe a costi accessibili alla maggior parte dei centri di ricerca. Le GPU sono molto più veloci dei tradizionali processori CPU (Central Processing Unit) presenti in pressoché tutti i pc e computer di uso comune. Permettono infatti di eseguire le stesse simulazioni anche in un centesimo del tempo che impiegano le CPU. La possibilità di avere "esplorazioni" più lunghe, più accurate e in tempi ragionevoli sulle proteine, ha pesantissime ricadute nella comprensione del meccanismo molecolare di quelle proteine interessanti per la creazione di nuovi farmaci. Questi argomenti saranno affrontati da Andrea Cristiani, ricercatore con il quale collaboro a questo tipo di simulazioni, durante il seminario del 4 maggio”.

Archimede Webzine: <http://www.sardegna.ricerche.it/magazine/ricercanelparco/>