



UNIVERSITÀ  
DEGLI STUDI  
DI PADOVA

UFFICIO STAMPA

VIA VIII FEBBRAIO 2, 35122 PADOVA

TEL. 049/8273041-3066-3520

FAX 049/8273050

E-MAIL: [stampa@unipd.it](mailto:stampa@unipd.it)

AREA STAMPA: <http://www.unipd.it/comunicati>

Padova, 17 marzo 2017

## RENDEZ-VOUS MOLECOLARE

**Ricercatori dell'Università di Padova mettono a punto una tecnica che svela il meccanismo dell'incontro e del riconoscimento tra proteine e peptidi**

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

**In uno studio pubblicato in questi giorni nella 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 certamente 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 il **prof. 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 ci fanno 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.

**«In particolare, il nostro gruppo di ricerca – continua il prof. Moro -, ha utilizzato un innovativo approccio *in silico* per caratterizzare il complesso meccanismo di identificazione che interviene nel riconoscimento tra una proteina ed un sistema peptidico. Si tratta di**



UNIVERSITÀ  
DEGLI STUDI  
DI PADOVA

#### UFFICIO STAMPA

VIA VIII FEBBRAIO 2, 35122 PADOVA

TEL. 049/8273041-3066-3520

FAX 049/8273050

E-MAIL: [stampa@unipd.it](mailto:stampa@unipd.it)

AREA STAMPA: <http://www.unipd.it/comunicati>

processi che sono alla base di innumerevoli e fondamentali eventi biologici a livello cellulare, ma anche il punto di partenza per la progettazione nuovi farmaci di natura biotecnologica utilizzati nella medicina di precisione. Questa rappresenta uno degli ambiti di lavoro più affascinanti nei quali ci troviamo a lavorare da qualche anno.»

La complessità nel descrivere in maniera accurata la successione di eventi molecolari risiede nei tempi di simulazione richiesti per esplorare l'intero processo: 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.**