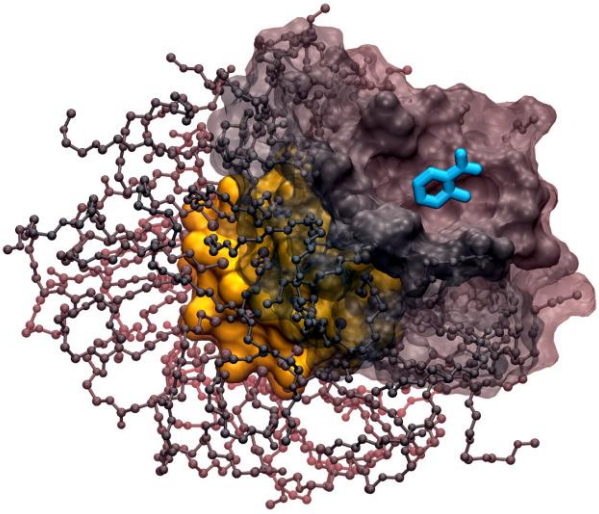
Padova, 14 luglio 2017

COMUNICATO STAMPA

IIT – ISTITUTO ITALIANO DI TECNOLOGIA E UNIVERSITÀ DI PADOVA: INDIVIDUATI NUOVI SENSORI NANOTECNOLOGICI PER LA DIAGNOSI PRECOCE DI TUMORI E IL RICONOSCIMENTO DI SOSTANZE TOSSICHE NEL SANGUE

Lo studio è stato scelto come copertina della nuova rivista scientifica internazionale Chem, di Cell Press.

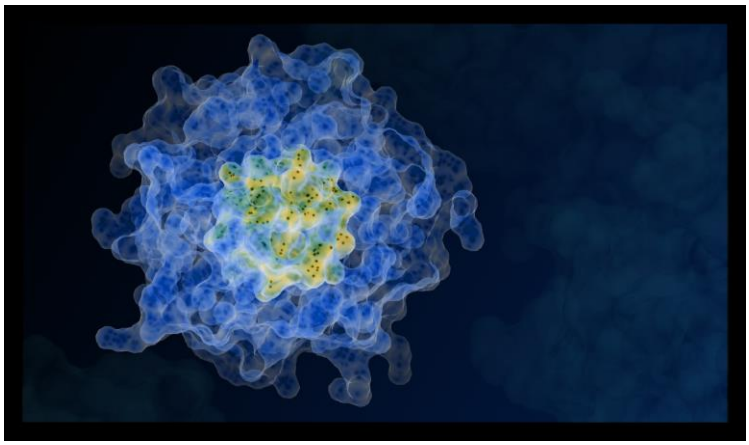


Genova, 14 luglio 2017 – Il team di ricerca di **Molecular Modeling & Drug Discovery** di **IIT –Istituto Italiano di Tecnologia**, guidato da Marco De Vivo insieme **ai gruppi di ricerca dell'Università di Padova** guidati da Fabrizio Mancin e Federico Rastrelli, hanno realizzato una nuova scoperta con importanti prospettive nell'ambito della medicina personalizzata.

In particolare la scoperta consiste nell'aver chiarito come nanoparticelle artificiali possano avere funzioni che simulano il comportamento delle proteine, molecole biologiche essenziali alla vita. Ciò consente di costruire nanoparticelle artificiali con funzione di sensori diagnostici per il tumore, o capaci di rilevare la presenza di sostanze tossiche nel sangue, come droghe o sostanze dopanti.

Lo studio scientifico è stato appena pubblicato sulla rivista internazionale **Chem** aggiudicandosi anche la copertina della rivista.

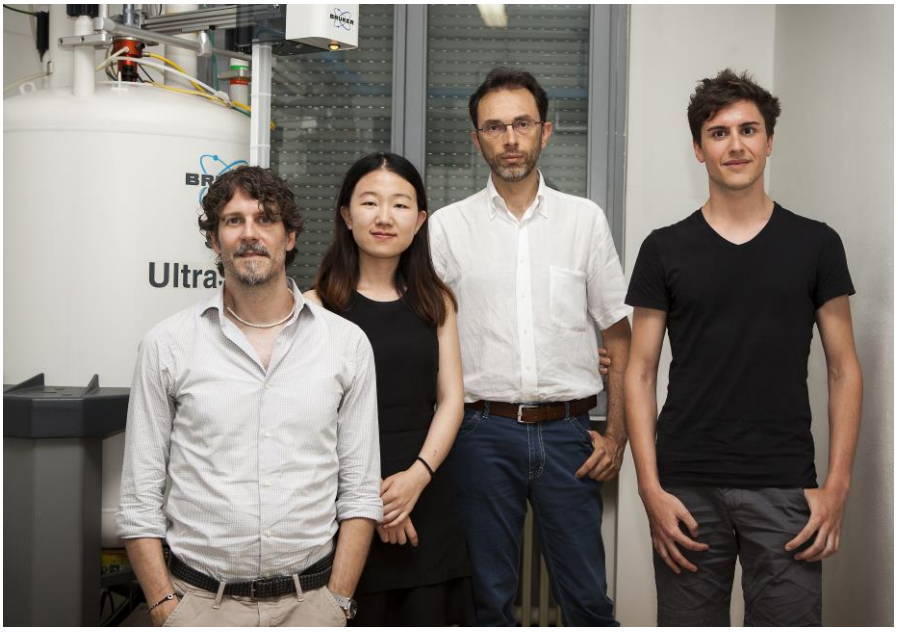
Lo studio, la cui prima autrice è Laura Riccardi di IIT, chiarisce come le nanoparticelle (oggetti artificiali, molto dinamici e delle dimensioni del miliardesimo di metro) possono essere *funzionalizzate* in maniera intelligente in modo da conferire loro nuove capacità. Queste nanoparticelle sono composte da un nucleo metallico centrale di atomi d'oro con funzione strutturale a cui sono legate piccole molecole che regolano la funzione della nanoparticella formando la superficie della nanoparticella stessa.



"In questo studio abbiamo dimostrato come i gruppi che compongono le molecole legate al nucleo determinano quale tipo di molecola sarà riconosciuta, in base a specifiche interazioni atomiche – commenta **Marco De Vivo, a capo del team**

Molecular Modeling & Drug Discovery di IIT - Questa scoperta apre alla possibilità di creare nanoparticelle ingegnerizzate per riconoscere specifiche sostanze d'interesse, come fanno le proteine in Natura".

"L'interazione tra team d'eccellenza, ognuno con uno specifico knowhow nel proprio settore di ricerca - dichiara **Fabrizio Mancin, alla guida del gruppo di ricerca dell'Università di Padova** - ha fatto sì che studi sperimentali e teorici si incontrassero per comprendere a fondo il fenomeno del riconoscimento molecolare tra nanoparticelle e analiti, piccole molecole presenti in soluzione".

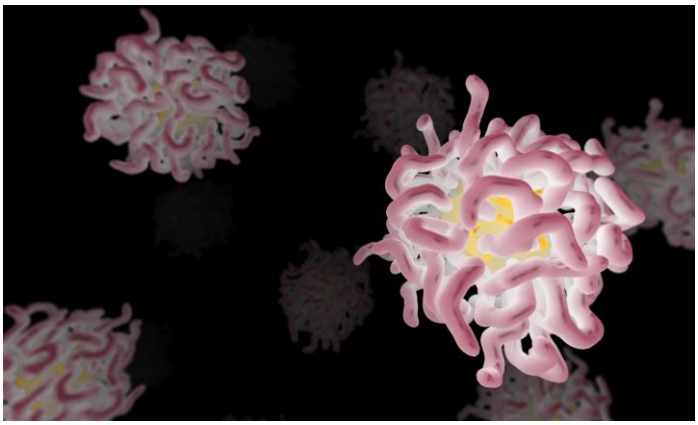


TEAM UNIVERSITA' DI PADOVA

Il dato sperimentale, dimostrato da **Federico Rastrelli dell'Università di Padova** attraverso l'uso della risonanza magnetica nucleare (NMR), è che nanoparticelle messe in soluzione possono riconoscere selettivamente un certo analita, "A", piuttosto che un altro, "B".

La teoria alla base di questa evidenza empirica, ora, è stata fornita attraverso la sinergia di esperimenti NMR e simulazioni molecolari fatte da IIT, tramite l'uso del supercomputer.

Le simulazioni mostrano che le nanoparticelle assumono una forma diversa in soluzione a seconda della struttura chimica delle molecole che le ricoprono, e in base alla conformazione assunta dalla superficie avviene il riconoscimento dell'una o dell'altra sostanza presente in soluzione. Sulla superficie delle nanoparticelle infatti si formano veri e propri siti di riconoscimento, tasche transienti e dinamiche che legano la sostanza "A" piutosto che la "B", analogamente a quanto si sa succedere nelle proteine, che riconoscono sostanze seguendo il modello "della serratura e della chiave" dove la serratura è uno specifico sito di interazione e la chiave l'analita riconosciuto.



Questo studio rappresenta un importante traguardo per la conoscenza delle nanoparticelle che apre nuove prospettive per studi e applicazioni in campo pratico. Potendo contare sulla comprensione atomistica del fenomeno di riconoscimento nanoparticella-analita, sarà possibile fare "*design razionale*" di nuove nanoparticelle in grado di riconoscere specifici analiti. Gli obiettivi sono quelli di creare nanoparticelle

ingegnerizzate perché in futuro si riesca ad individuare molecole presenti anche a bassissime concentrazioni nei campioni da analizzare, rendendo possibile l'attuazione di tecniche analitiche più rapide e meno costose di quelle attualmente in uso negli ospedali e nei centri dedicati per la ricerca di marcatori cancerogeni o sostanze stupefacenti e dopanti nel sangue dei pazienti.

IIT - ISTITUTO ITALIANO DI TECNOLOGIA

È un centro di ricerca scientifica che promuove lo sviluppo tecnologico. Conta circa 1500 dipendenti, di cui il 90% di area scientifica. Con più di 8000 pubblicazioni, oltre 130 progetti Europei e 16 ERC, 480 titoli di brevetti attivi, 18 start up costituite e 20 in fase di lancio. Nel 2016 secondo il rapporto di Valutazione della Qualità della Ricerca a cura di Anvur IIT è risultato primo in Italia nelle seguenti 5 aree scientifiche - scienze matematiche ed informatiche, scienze chimiche, scienze biologiche, ingegneria industriale e dell'informazione e scienze psicologiche - e secondo nelle scienze fisiche.
Insieme al Central Lab di Genova (30 mila m^2) IIT conta 11 centri di ricerca nel territorio nazionale (a Torino, 2 a Milano, Trento, Roma, Pisa, Napoli, Lecce, Ferrara) e 2 negli USA (MIT e Harvard).

Contatti Ufficio Stampa:

Camilla Dalla Bona
IIT, Istituto Italiano di Tecnologia
camilla.dallabona@iit.it
M: +39 333 4578515
W: www.iit.it

Giuliano Greco
IIT, Istituto Italiano di Tecnologia
giuliano.greco@iit.it
M: +39 366 910 7863
W: www.iit.it

Valentina Polini
IIT, Istituto Italiano di Tecnologia
valentina.polini@iit.it
M: +39 366 692 2850
W: www.iit.it

Carla Menaldo
Università degli Studi di Padova
carla.menaldo@unipd.it
M +39 334 6962662
W: www.unipd.it

PRESS RELEASE

IIT – ISTITUTO ITALIANO DI TECNOLOGIA AND UNIVERSITY OF PADOVA: DEVELOPED NEW NANOTECHNOLOGICAL SENSORS FOR THE EARLY DIAGNOSIS OF TUMORS AND THE DETECTION OF TOXIC SUBSTANCES IN BLOOD

The study was selected for the cover of the new international scientific journal Chem, by Cell Press.

July 13, 2017 - The Molecular Modeling & Drug Discovery research team at IIT, led by Marco De Vivo, along with the University of Padova research groups led by Fabrizio Mancin and Federico Rastrelli, report a new discovery with important prospects in the field of personalized medicine.

In particular, the study clarifies how artificial nanoparticles can perform molecular recognition similarly to proteins. This allows realizing artificial nanoparticles with the function of tumor diagnostic sensors, or capable to detect the presence of toxic substances in the blood, such as drugs or doping chemicals.

These results have just been published in the journal Chem, being also awarded with the cover picture.

The study, whose first author is Laura Riccardi of IIT, explains how nanoparticles (artificial objects, highly dynamic and with the size of a billionth of meter) can be properly functionalized to give them new capabilities. These nanoparticles are made of a central metallic nucleus of gold atoms, having here a structural function, to which small molecules are bound, covering the surface of the gold nucleus and regulating its function.

"In this study we have shown how the functional groups present in the molecules that coat the nucleus determine what type of molecule will be recognized, based on specific atomic interactions" commented Marco De Vivo, head of the IIT Molecular Modeling & Drug Discovery team. This discovery discloses the possibility of creating nanoparticles engineered to recognize specific substances of interest, as do proteins in Nature. "

"The interaction between excellence teams, each with a specific know-how in their research field," said Fabrizio Mancin, head of the research team at the University of Padova, “allowed a convergence of experimental and theoretical studies to deeply understand the phenomenon of molecular recognition between nanoparticles and analytes, i.e. small molecules present in solution."

The experimental data, obtained by Federico Rastrelli of the University of Padova using nuclear magnetic resonance (NMR) techniques, reveal that nanoparticles in solution can selectively recognize and that a specific analyte i.e the analyte "A" rather than another analyte "B".

A theory underlying this empirical evidence has now been provided through the synergy of NMR experiments and molecular dynamics simulations made at IIT through the use of a supercomputer.

The simulations show how nanoparticles take a different shape in solution depending on the chemical structure of the covering molecules: thus, according to the most stable adopted conformation, they recognize one or another substance present in the solution. Indeed, on the surface of the nanoparticle, recognition sites were here observed for the first time. These sites are transient and dynamic pockets that allow selectively binding substance "A" or "B", similarly to what happens with proteins. The recognition

principle follows the "lock and key" paradigm, where the lock is a specific interaction site and the key is the recognized analyte.

This study represents the achievement of an important goal in increasing our understanding of nanoparticles and opens new perspectives for practical studies and applications. With an atomic viewpoint on the nanoparticle-analyte recognition phenomenon, it will be possible to implement the computer-aided design of new nanoparticles capable of recognizing specific analytes. The goals are to create such engineered nanoparticles to identify molecules even at very low concentrations in the samples to analyze. This would enable the implementation of faster and cheaper analytical techniques than those currently in use in hospitals and dedicated centers for the detection of carcinogenic markers or narcotics and dopants in the blood of patients.