

 Contenuto archiviato il 2023-03-02

La modellazione computazionale consente di comprendere la fusione della membrana cellulare

Un'équipe di ricercatori di Francia, Regno Unito e Austria ha modellato il complesso proteico SNARE, che agisce come catalizzatore nella fusione di due membrane, utilizzando la potenza di elaborazione dell'infrastruttura europea per applicazioni di supercalcolo (DEISA). Gli st...



Un'équipe di ricercatori di Francia, Regno Unito e Austria ha modellato il complesso proteico SNARE, che agisce come catalizzatore nella fusione di due membrane, utilizzando la potenza di elaborazione dell'infrastruttura europea per applicazioni di supercalcolo (DEISA). Gli studiosi auspicano di creare nuove opportunità per lo sviluppo in

campo farmaceutico.

«La ricerca di base è fondamentale, in quanto esistono numerosi aspetti relativi al funzionamento delle proteine e delle membrane cellulari che non sono ancora completamente conosciuti. Una migliore comprensione di questi meccanismi semplificherà, per esempio, lo sviluppo di nuovi agenti farmaceutici», spiega il dottor Marc Baaden, ricercatore del laboratorio di biochimica teorica di Parigi.

«Esaminando un fenomeno a livello atomico, possiamo ottenere informazioni approfondite su scala più ampia riguardo al funzionamento delle membrane cellulari e delle proteine in generale.»

Molte malattie vengono associate a disordini funzionali delle membrane cellulari. Nel caso esaminato dal dottor Baaden e i suoi colleghi, le membrane cellulari non si fondono o lo fanno con troppa difficoltà. Il complesso proteico SNARE è responsabile di questa fusione. Il malfunzionamento delle proteine SNARE può avvenire, per

esempio, all'insorgere del diabete negli adulti. Quindi, capire la funzione dello SNARE può favorire lo sviluppo di nuovi trattamenti terapeutici. Oltre alla scienza medica, anche l'industria cosmetica e la nanotecnologia trarranno vantaggio da una migliore comprensione del funzionamento proteico.

«La conoscenza del funzionamento delle membrane cellulari creerà opportunità anche nel campo delle nanotecnologie. In termini tecnici, le proteine che studiamo sono macchine intelligenti che svolgono i compiti stabiliti in modo eccellente, ossia fondere saldamente insieme due membrane lipidiche», osserva il dottor Baaden.

Spesso gli scienziati devono utilizzare carta e penna per descrivere quanto avviene a livello molecolare, una tecnica che il dottor Baaden chiama «biologia del disegno animato» e che critica in quanto facilmente fuorviante; agli scienziati coinvolti in questa ricerca, invece, è stato accordato l'accesso alla rete DEISA nell'ambito della DECI (DEISA Extreme Computing Initiative), consentendo loro di sviluppare un modello straordinariamente complesso.

«La creazione computazionale di modelli molecolari, o simulazione, tiene conto delle proprietà fisiche in un modo più realistico», dichiara il dottor Baaden e aggiunge che «un valido modello molecolare ci consente di osservare i più piccoli dettagli del sistema in maniera controllata e nelle circostanze desiderate. Possiamo anche cambiare con facilità alcune delle proprietà del modello al fine di sperimentare ipotesi diverse». Pertanto, la simulazione semplifica l'esame degli eventi dinamici.

«Solitamente, la modellazione computazionale è stata applicata al fine di simulare un'unica membrana, che è già un compito impegnativo. Tuttavia, noi abbiamo simulato due membrane lipidiche unite da un complesso proteico, per cui la nostra sfida era persino maggiore», afferma il dottor Baaden.

Secondo lo studioso, in futuro i metodi di simulazione dovranno combinare la modellazione altamente precisa a livello atomico con modelli meno dettagliati che simulano un episodio più esteso. Inoltre, «è importante la comunicazione tra simulazioni a diversi livelli. Questo ci consentirà di simulare in modo più accurato un dettaglio di particolare importanza, nonché entità di maggiori dimensioni tramite modelli grossolani», conclude il dottor Baaden.

Articoli correlati



Griglie di supercalcolo si sostengono a vicenda per far fronte a una sfida medica

14 Dicembre 2007



Tempi di calcolo per 45 progetti sulla rete di supercalcolo europea DEISA

5 Novembre 2007

Ultimo aggiornamento: 6 Novembre 2007

Permalink: <https://cordis.europa.eu/article/id/28640-computational-modelling-allows-insights-into-cell-membrane-fusion/it>

European Union, 2025