

Come pezzi di un grande meccano

Sulla rivista Structure il metodo di analisi delle molecole sviluppato alla Sissa

Anche con informazioni frammentarie è possibile capire quali sub-unità meccaniche costituiscono una proteina e come queste si muovono le une rispetto alle altre, per stabilire come la molecola svolge le sue funzioni. Un gruppo di ricerca della Sissa (in collaborazione con la Temple University di Philadelphia) ha sviluppato per questo scopo un nuovo metodo di analisi al calcolatore della dinamica interna delle molecole, dimostrandone l'efficienza e versatilità. Lo studio è stato scelto come sto-

ria di copertina dalla rivista Structure.

Possiamo immaginare le molecole come costituite da un certo numero di tasselli, liberi di muoversi gli uni rispetto agli altri con un certo grado di libertà, come i pezzi del meccano che pur incastrandosi fra loro mantengono la possibilità di muoversi e ruotare. Conoscere come le sub-unità proteiche si muovono è importante per comprendere la funzione della proteina, per questo motivo gli studi sulla dinamica interna molecolare han-

no attratto negli ultimi anni l'attenzione degli scienziati. Spesso però, che siano dati sperimentali o ricavati da modelli al computer, le informazioni a disposizione del ricercatore sono frammentarie. «È un po' come se avendo a disposizione solo pochi 'fermi immagine' di un filmato si dovesse ricostruire l'intera storia», spiega Luca Ponzoni, dottorando della Scuola Internazionale Superiore di Studi Avanzati di Trieste e primo autore della nuova ricerca. «A volte abbiamo solo qualche

'istantanea' della dinamica interna di una proteina e dobbiamo da qui ricostruire la sua funzione».

Nel loro studio Ponzoni e colleghi hanno sviluppato una metodologia chiamata Spectrus, che permette di identificare le sub-unità "semi-rigide" che costituiscono le proteine e ricostruire il loro movimento a partire da poche informazioni. «Conoscendo la dinamica interna possiamo capire cose importanti», spiega Cristian Micheletti, professore della Sissa che ha coor-

dinato lo studio. «Prendiamo per esempio un enzima: dove due sub-unità si congiungono di solito si trovano i siti attivi che legano altre molecole all'enzima, che così può svolgere la sua funzione di catalizzatore».

«Il metodo che abbiamo usato si è dimostrato efficiente e affidabile», continua Ponzoni. «Per esempio, è in grado di identificare correttamente i moduli meccanici di una proteina partendo anche solo da pochi fotogrammi, per restare nella metafora, fornendo previsioni consistenti con quelle basate su metodi molto più complessi, e che necessitano di interi filmati. I nostri risultati inoltre si sono rivelati coerenti con quelli di osservazioni sperimentali».