

RICERCA DI FRONTIERA

I farmaci del futuro? Oggetti di design

Con potenti computer si disegnano piccole molecole che agiscono sul movimento delle proteine

di **Francesca Cerati**

Il sistema per aggiudicarsi il finanziamento era già contenuto nella sua denominazione: "Premio Fondazione Cariplo per la ricerca di frontiera". E così è stato. La giuria internazionale, composta da illustri personaggi del mondo della chimica, tra cui due premi Nobel, ha decretato i vincitori: cinque le idee ai confini della conoscenza premiate che dovranno divi-

Presentati i progetti vincitori del premio Fondazione Cariplo per la chimica pura

dersi 885mila euro e non i 500mila stanziati all'inizio. Un "aumento di capitale" a conferma del fatto che le proposte giunte e valutate sono state davvero interessanti.

Uniti dal filo rosso della chimica, i progetti spaziano da nuove classi di farmaci a nuove concezioni di strumenti diagnostici, fino a soluzioni super efficienti per ottenere energia da fonti rinnovabili. Con l'assegnazione di 230mila euro, il progetto Checops si è guadagnato il primo premio. Tema: sviluppare inediti concetti di design molecolare per scoprire una nuova classe di farmaci: i regolatori cellulari. A coordinarlo è Giorgio Colombo, 40 anni, rientrato in Italia nel 2001, dopo un'esperienza negli Stati Uniti e in Olanda. Due i centri coinvolti in questa ricerca: l'Istituto di chimica del riconoscimento molecolare del Cnr di Milano, dove Colombo è ricercatore, e il dipartimento di Chimica organica e

industriale dell'Università di Milano.

Il progetto di Colombo riguarda lo studio del funzionamento di una proteina, la Hsp90, che è coinvolta nello sviluppo incontrollato delle cellule tumorali, ma anche nelle malattie neurodegenerative. «Dobbiamo immaginare le proteine come "macchine molecolari" dinamiche che per funzionare devono eseguire movimenti ben definiti e coordinati». Primo step, quindi, è definire i movimenti funzionali di Hsp90 per poi progettare delle piccole molecole (small drug) che bloccano tale attività. Un compito complesso, anche perché tra tutti i movimenti apparentemente casuali occorre scoprire quelli coinvolti nelle malattie e di conseguenza da inibire o stimolare a seconda dei casi.

«Partendo dalla struttura della proteina, e grazie alla potenza di calcolo dei grandi cluster di computer, siamo in grado di costruire modelli teorici che permettono di risalire al funzionamento dinamico delle proteine. La nostra peculiarità – spiega Colombo – sta nel fatto di aver messo a punto un sistema semplice di calcolo, di simulazione teorica».

I dettagli a livello atomico di una proteina in movimento, possono essere ricavati solo in modo teorico, per mezzo della dinamica molecolare. «Si tratta di un metodo di calcolo – continua Colombo – che basandosi su leggi fisiche e sulle proprietà chimiche delle molecole, partendo da una struttura statica è in grado di simularne i movimenti in modo realistico e con un dettaglio atomico. Attraverso la simulazione, è possibile scoprire quali sono le aree della proteina implicate nella sua azione e di conseguenza ipotizzare dei meccanismi su cui intervenire con piccole molecole progettate ad hoc».

Dopo il successo del lancio sperimentale del Premio per la ricerca di frontiera, la Fondazione Cariplo ha deciso che di renderlo un appuntamento fisso per il mondo della ricerca lombarda, autorizzando fin da ora un finanziamento di un milione di euro sia nel 2012 sia nel 2013.



ANSA

Chi è

Il biologo israeliano Aaron Ciechanover, nato ad Haifa nel 1947, ha vinto nel 2004 con Avram Hershko e Irwin Rose il premio Nobel per la Chimica per aver chiarito le funzioni basilari della ubiquitina, una proteina presente in tutte le cellule: se è incollata a una proteina questa verrà inesorabilmente distrutta dagli enzimi, che come dei tritarifiuti spezzettano la cellula in tanti frammenti. Lo scienziato, con altri 4 esperti, ha fatto parte della giuria del Premio Fondazione Cariplo. Attualmente dirige il Rappaport family Institute for research in medical sciences del Technion.



© RIPRODUZIONE RISERVATA