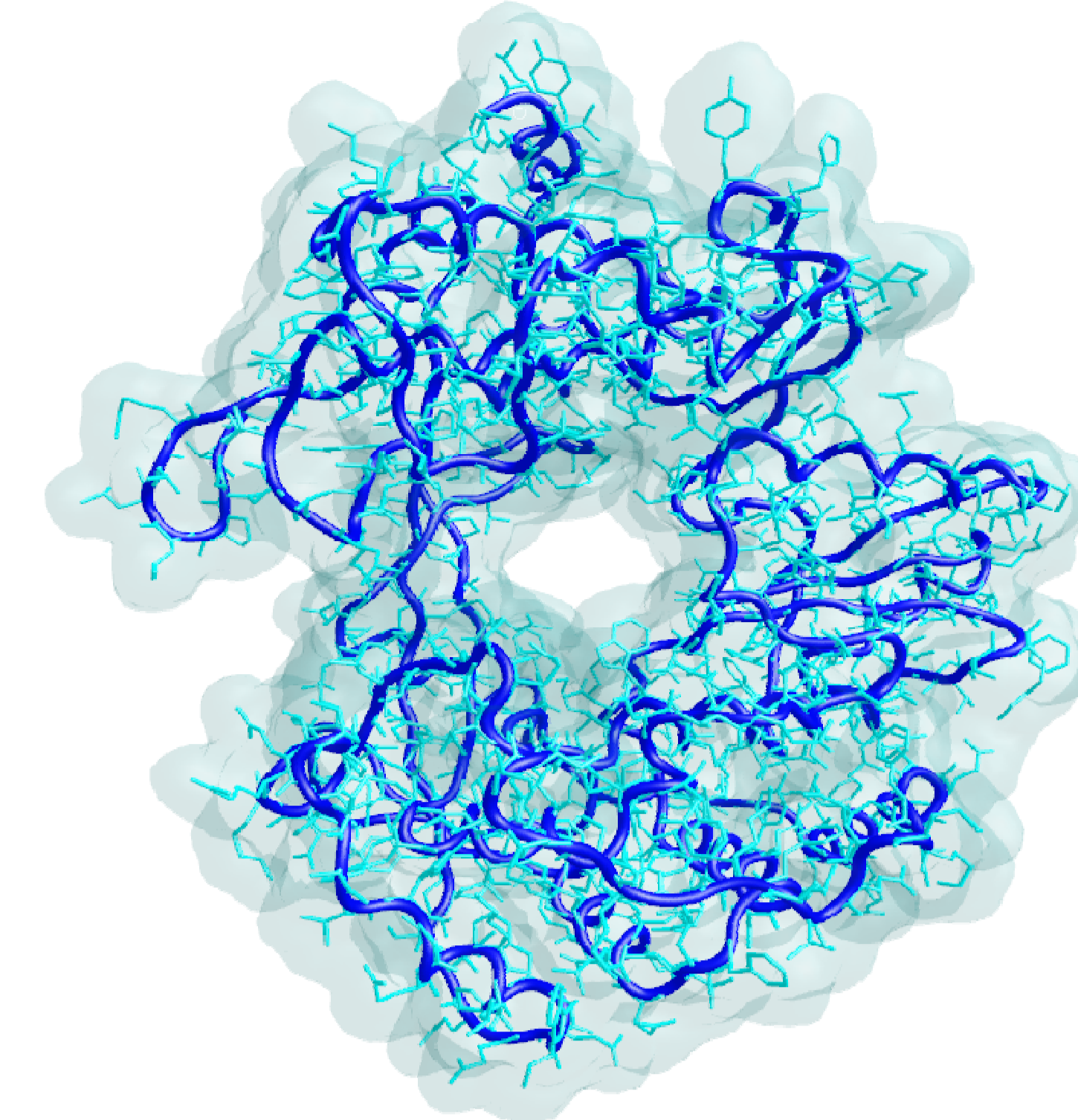




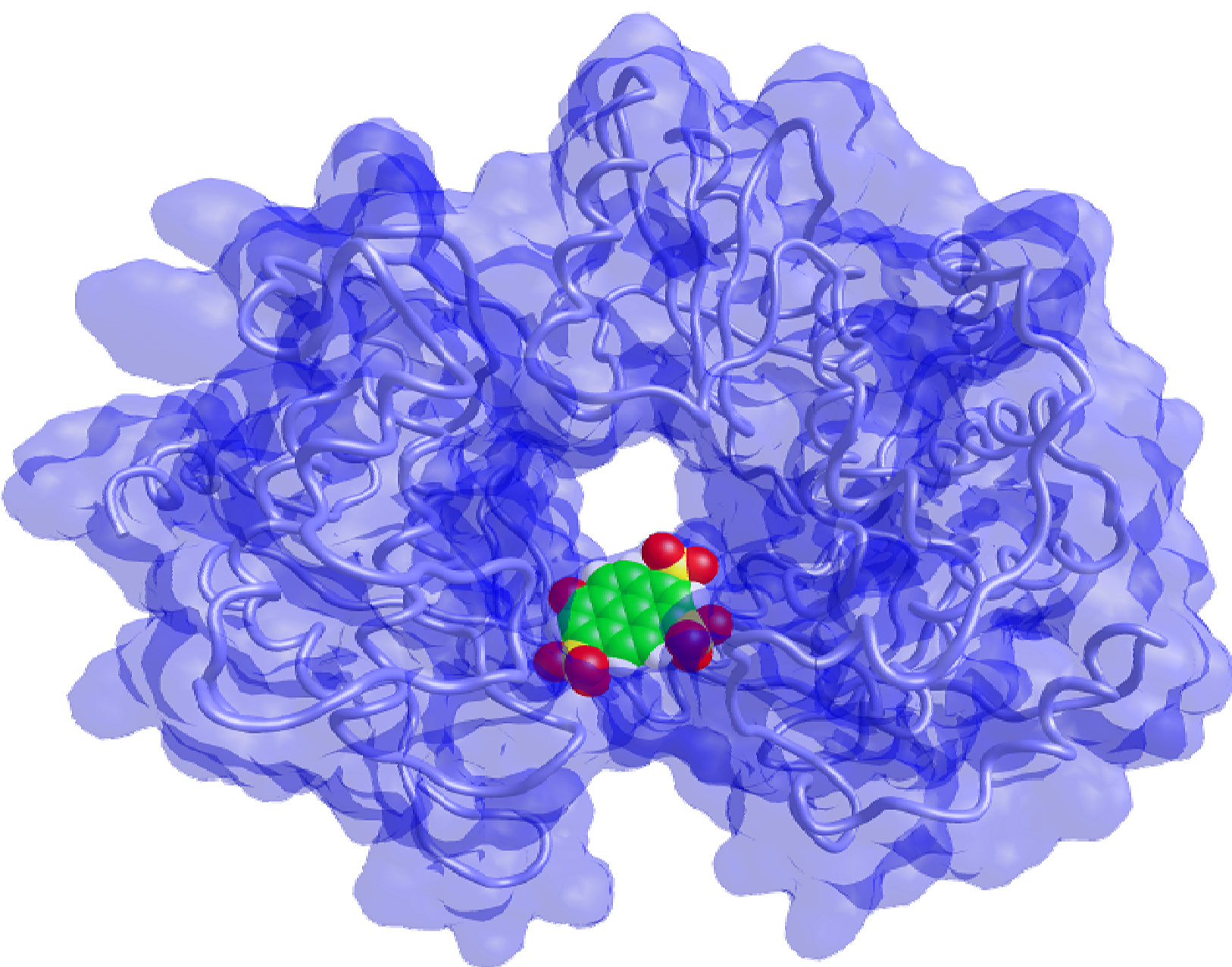
Parco Scientifico e Tecnologico della Sicilia

Stradale V.Lancia 57, Z. I. Blocco Palma 1
95121 Catania-Italy

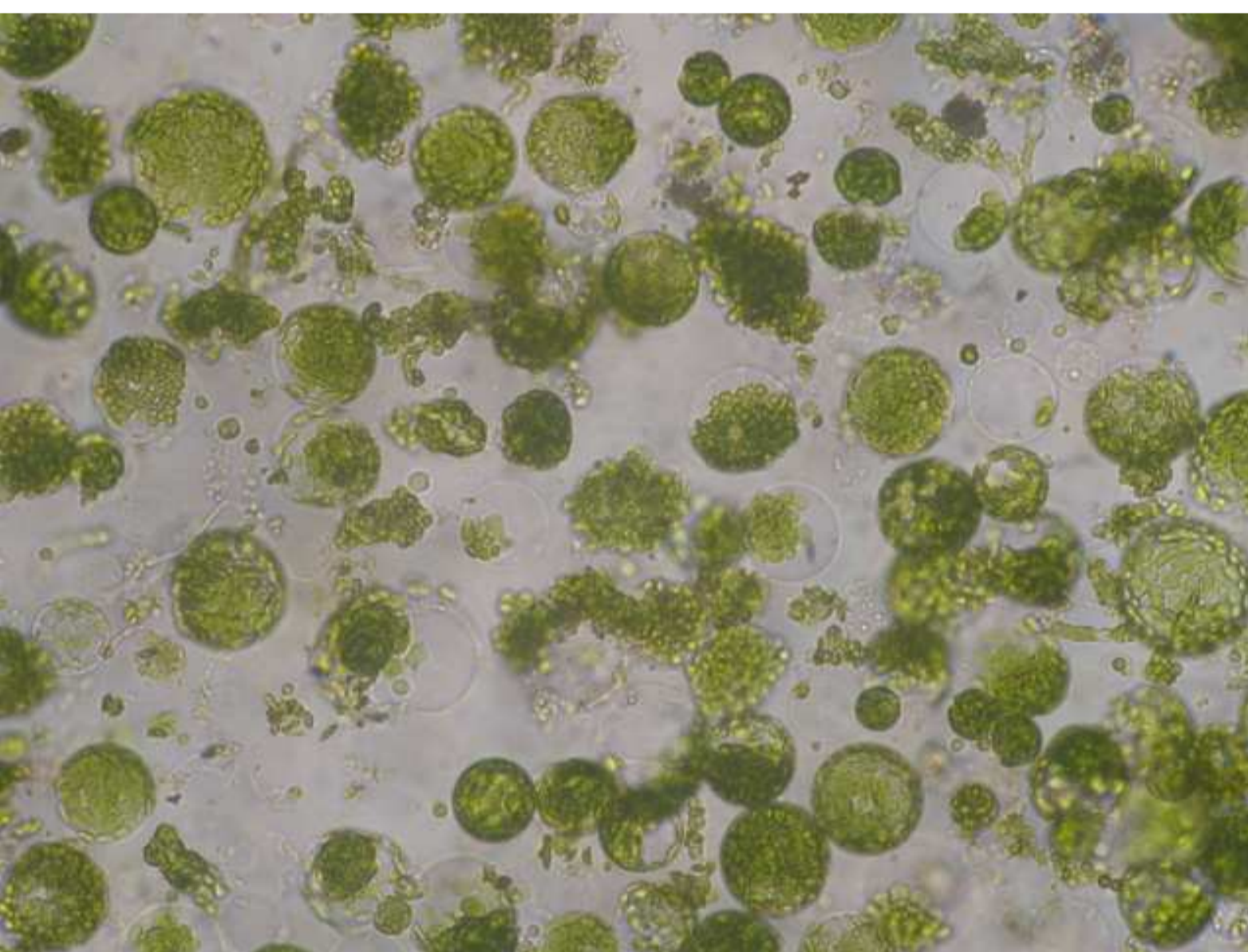
www.pstsicilia.org – info.ct@pstsicilia.org



Impiego di metodiche computazionali basate su GRID nella progettazione di molecole bioattive



L'identificazione di nuove molecole bioattive (*drug discovery*) è un processo particolarmente lungo che richiede l'impiego di importanti risorse economiche. Moderni sistemi di calcolo ad elevate prestazioni hanno permesso di mettere a punto metodiche computazionali *in silico* finalizzate all'abbattimento dei tempi e conseguentemente dei costi del processo di *drug discovery*. Esse rendono possibile la comprensione dei meccanismi con cui il farmaco esplica la propria azione senza coinvolgere studi di tipo sperimentale (*in vitro* o *in vivo*) attraverso la realizzazione di un modello teorico (*modello farmacoforico*) che permette di estrapolare le informazioni fondamentali per la progettazione di nuove molecole, mediante lo studio delle interazioni del farmaco col relativo bersaglio (*molecular docking*). Il modello farmacoforico è anche utilizzato come filtro per selezionare molecole potenzialmente interessanti (*virtual screening*) disponibili su grandi database. Questo approccio permette di riconsiderare molecole per utilizzi anche estremamente diversi da quelli per le quali erano state inizialmente pensate, con indubbi vantaggi economici.



GriDock

GriDock è un software di *molecular modeling* sviluppato per identificare composti potenzialmente bioattivi (*hit-compounds*), attraverso l'approccio del *virtual screening* un ampio set di molecole viene predetta attraverso *docking* multipli distribuiti su una rete Grid.

L'applicazione è stata trasferita sull'infrastruttura Grid siciliana risolvendo i problemi di parallelizzazione.

RISULTATI

Le potenzialità di GriDock sono state recentemente testate per il *Citrus tristeza virus* (CTV), l'agente causale di una delle malattie più importanti da un punto di vista economico del genere *Citrus*. Numerosi ricercatori identificano come possibile bersaglio terapeutico dato il ruolo cruciale di questo enzima nella replicazione virale. La ricerca è stata incentrata sulla modellizzazione della RNA-polimerasi RNA-dipendente (RdRp) e sull'identificazione di potenziali inibitori dell'enzima attraverso *virtual screening*.

Tre delle molecole identificate, aventi degli *score* di legame elevato, sono attualmente in fase di test per la verifica sperimentale *in vitro* ed *in vivo*.

Contatto: Alessandro Lombardo; alombardo@pstsicilia.org

