

DATA: 01 giugno 2011

16.30 - 18.00

LUOGO: Aula Magna Dip. Fisica, Cittadella Universitaria (Monserrato)

TITOLO:

## Applicazione in campo biomedico del modelling di proteine: il caso della interazione tra Citokine e MT-gase

ABSTRACT:

Oltre alle tradizionali molecole chimiche farmacologicamente attive, si stanno imponendo come sostanze terapeuticamente attive anche i composti endogeni (proteine, anticorpi monoclonali, ecc.), comunemente noti come biofarmaci.

In questo seminario verrà illustrato lo studio di modellazione computazionale svolto su una classe specifica di biofarmaci, le citokine, usate per scopi terapeutici nella cura di varie malattie (es. neutropenie, malattie autoimmuni, ecc.).

Nel corso dello studio sono state svolte "in silico" una serie di analisi della struttura e dei movimenti di tali proteine, utilizzando varie tecniche computazionali di bioinformatica e modellistica di proteine (dinamica molecolare, docking, predizione di patches idrofobici).

I risultati computazionali, affiancandosi agli studi biochimici di laboratorio, sono stati utilizzati per produrre farmaci con accresciuta bio-assimilabilità, che si traduce in un migliore assorbimento ed in una minore quantità di farmaco da assumere.

Altri benefici collaterali di questo tipo di approccio sono la diminuzione dei costi di progettazione dei biofarmaci e la possibilità di effettuare studi più veloci rispetto ad uno studio puramente sperimentale.

RELATORE:

Maria Valentini (CRS4)

 Collana di Seminari per la Valorizzazione dei Risultati della Ricerca al CRS4

01.06.2011

 Seminario 16:30 - 18:00  
 AULA MAGNA DIP. FISICA  
 Cittadella Universitaria - Monserrato

 Applicazione in campo biomedico  
 del modelling di proteine:  
 il caso della interazione tra Citokine e MT-gase

 Relatore  
 Maria Valentini  
 CRS4

 Contatti  
 www.crs4.it

 Info e registrazione  
 www.crs4.it

 Segreteria  
 www.crs4.it


Maria si è laureata in Fisica nel 1991 presso l'Università di Bologna con una tesi di Cosmologia riguardante la struttura e moti su grande scala nell'Universo. Dal 1992 comincia a lavorare nel gruppo di Calcolo Parallelo al neo nato CRS4 sulla parallelizzazione di codici di dinamica molecolare. Nell'aprile 1994 le viene attribuita una borsa EU Marie-Curie FP6 presso il laboratorio del CNRS Laboratoire des Physique des Milieux Ionise (LPMI), Ecole Polytechnique, Palaiseau, Francia. Nel 1998 ha conseguito il PhD in Fisica dei Plasmi all'Ecole Doctorale de Troisième Cycle DE L'Ecole Polytechnique con una tesi sulla analisi teorica e computazionale del moto di particelle cariche in campi elettro-magnetici.

Dal maggio 1999 è ricercatrice expert presso l'area Fuel Cell del CRS4 occupandosi di simulazioni di dinamica molecolare di membrane conduttrici protoniche e dello sviluppo di un codice ai volumi finiti per sistemi elettrochimici.

Nel maggio 2006 si trasferisce al gruppo di Bioinformatica del CRS4 dove si occupa di struttura e dinamica di proteine. Nello stesso anno consegue un master in Bioinformatica con una tesi sul docking proteina-proteina su grande scala. Dall'inizio del 2010 fa parte del gruppo AGCT presso il CRS4 dove si occupa di analisi di dati per studi casi-controllo nelle malattie genetiche. Maria è interessata allo studio della struttura e dinamica delle proteine attraverso lo sviluppo di nuove metodologie e force fields.

**PAROLE CHIAVE:** Protein structure, dinamica molecolare, docking proteina-proteina.