



Consiglio Nazionale delle Ricerche

INFM

Istituto Nazionale per la Fisica della Materia



SAPIENZA  
UNIVERSITÀ DI ROMA

## COMUNICATO STAMPA

# Un modello per simulare le reazioni cellulari

*Nasce tra Roma, Trieste e Londra un innovativo modello teorico per l'analisi e la predizione del metabolismo cellulare, capace di valutare il complesso delle reazioni chimiche all'interno della cellula, e di indicare le criticità che possono causare patologie. Il modello potrà fornire indicazioni utili per lo sviluppo di farmaci mirati e per la migliore comprensione del delicato equilibrio cellulare. Il lavoro pubblicato su PNAS\*.*

Un modello teorico per ricostruire l'intricata rete delle reazioni chimiche cellulari, in grado di identificare quelle essenziali alla sopravvivenza o dalla cui irregolarità possono insorgere specifiche patologie. Questo è il risultato del lavoro pubblicato su PNAS da Andrea De Martino ed Enzo Marinari, del centro SMC di INFM-CNR e di Sapienza Università di Roma, Carlotta Martelli di Sapienza Università di Roma, Matteo Marsili del Centro Internazionale di Fisica Teorica di Trieste e Isaac Pérez Castillo del King's College di Londra.

Delle cellule, e delle strutture che le compongono, sappiamo già molto. Ciò che ancora non conosciamo bene, però, è la rete di reazioni chimiche che costantemente avvengono al loro interno, una sorta di intricata ragnatela di reazioni (circa un migliaio) per la maggior parte inaccessibile all'osservazione sperimentale. Con questa conoscenza potremmo chiarire molte delle vulnerabilità cellulari, precisando inoltre cause e meccanismi chimici alla base di numerose patologie. E potremmo capire meglio il ruolo svolto dai singoli geni nei processi cellulari, dato che ogni gene è legato a una reazione chimica attraverso l'enzima catalizzatore che questo esprime.

E' proprio questo l'obiettivo del modello teorico pubblicato dai ricercatori su PNAS. Fornire globalmente, attraverso una simulazione affidabile, quante più informazioni possibili sulle reazioni che coinvolgono la cellula. A partire dalla struttura della cellula e da poche altre condizioni iniziali, il modello è in grado di ricostruire le proprietà e la stabilità delle reazioni, identificando quelle essenziali alla sua sopravvivenza, o il cui malfunzionamento potrebbe essere causa di gravi disturbi. Testato simulando la catena di reazioni di cellule di *Escherichia Coli*, un comune batterio, il modello ha dato risultati positivi, fornendo previsioni sulla qualità e quantità delle reazioni chimiche in forte accordo con i dati sperimentali, e identificando la criticità di reazioni che sono effettivamente fondamentali per la sopravvivenza del batterio.

Le sue possibili applicazioni spaziano dalla ricerca sulla connessione tra reazioni chimiche cellulari e patologie allo sviluppo di nuovi farmaci. Nel primo caso, comprendere le reazioni più critiche e non ancora osservate sperimentalmente potrebbe far emergere delle connessioni tra queste e specifiche malattie. Per quanto riguarda invece la farmacopoesi, sapere quali reazioni sono maggiormente implicate in una data malattia, unita alla possibilità di valutare in cascata l'effetto di sostanze chimiche sulla cellula (come per esempio le molecole dei farmaci), potrebbe essere di grande aiuto per lo sviluppo di composti farmacologici.

Roma, 26 febbraio 2009

*PNAS, 24 febbraio 2009, vol 106 pp. 2607-2611, doi 10.1073/pnas.0813229106*

**CNR-Istituto Nazionale per la Fisica della Materia**

Ufficio Stampa

Lorenzo Del Pace

telefono: 3357905227

**e-mail: [lorenzo.delpace@infm.it](mailto:lorenzo.delpace@infm.it)**

**Università degli Studi di Roma "La Sapienza"**

Capo Ufficio Stampa: Alessandra Barberis

Addetti Stampa: Christian Benenati - Alessandra

Bomben - Barbara Sabatini - Stefania Sepulcri

T (+39) 06 4991 0035 - 0034 F (+39) 06 4991 0399

[comunicazione@uniroma1.it](mailto:comunicazione@uniroma1.it) [stampa@uniroma1.it](mailto:stampa@uniroma1.it)

[www.uniroma1.it](http://www.uniroma1.it)