

GRAFICA MOLECOLARE



CARTOLINE DALLA SCIENZA

A CURA DEL LABORATORIO
DELL'IMMAGINARIO
SCIENTIFICO DI TRIESTE

L'immagine che presentiamo raffigura la struttura di una proteina analoga a quella dello scorso numero, ripresa in piccolo qui a lato.

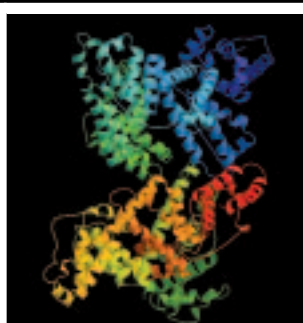
Quello che non si vede e che occorre sottolineare è che le due strutture sono state ottenute con due tecniche del tutto diverse. È la grafica molecolare che rende le immagini omologhe.

Di metodi per indagare la struttura delle macromolecole ne esistono tanti, ma i due più comuni sono senz'altro la cristallografia a raggi X e la spettroscopia NMR, che sono precisamente le tecniche con cui sono stati ottenuti i dati

per le nostre due immagini.

Difficile pensare a due tecniche più differenti. Le lunghezze d'onda della radiazione utilizzata per la cristallografia e per la risonanza stanno agli estremi opposti dello spettro delle onde elettromagnetiche: dagli angstrom per la cristallografia ai centimetri per la NMR.

La cristallografia usa i raggi X perché per "vedere" le molecole occorre illuminarle con una radiazione a una lunghezza d'onda inferiore alle loro dimensioni. Per amplificare il segnale luminoso è necessario poi utilizzare un campione cristallizzato, le cui celle diffrangono i raggi allo stesso modo. Dalla particolare diffrazione dei raggi prodotta da quel dato cristallo di sostanza pura, attraverso certe trasformazioni matema-



tiche, si possono ottenere i dati sulle distanze atomiche che poi vengono visualizzati nell'immagine. La necessità di utilizzare un cristallo, però, non solo restringe di molto il campo dei possibili campioni (non tutte le sostanze cristallizzano bene), ma anche forza la molecola che si vuole studiare a una particolare configurazione che non è detto sia la più tipica.

Per questo si ricorre alla NMR, che non "vede" gli atomi ma li "ascolta" utilizzando un campione in soluzione, i cui nuclei atomici vengono mandati in risonanza con onde radio. Dallo spettro delle

A lato, molecola di parvalbumina ricostruita da dati di spettroscopia NMR.

In basso a destra, molecola di albumina da dati di cristallografia a raggi X.

Immagine tratta dalla Protein Data Bank (Research Collaboratory for Structural Bioinformatics).

frequenze si risale con trasformazioni matematiche alla conformazione atomica. Il modo in cui risuonano i nuclei atomici non è però sempre scevro di ambiguità. Per questa ragione alla risonanza non si possono ricostruire molecole troppo complesse. D'altra parte, soprattutto per le terminazioni delle proteine, non ci si può fidare completamente della ricostruzione cristallografica, mentre la spettroscopia NMR dà delle informazioni più adeguate alla natura probabilistica delle configurazioni della proteina. Se la verità è così complessa e dinamica, perché usare una grafica 3D che dà l'idea di avere a che fare con un congegno meccanico? Il fatto è che il nostro occhio è molto più bravo di qualsiasi calcolatore a riconoscere somiglianze e pertinenze: la visualizzazione grafica ha quindi lo scopo di dare ai ricercatori la possibilità di rilevare quelle proprietà strutturali che possono indicare le funzioni della molecola. Bisogna stare attenti, però, a non scambiare le immagini per i loro oggetti. Tanto più quando la natura di questi ultimi è molto più quella di un accordo musicale che di un ingranaggio di orologeria.



Sessione Speciale dell'ONU sull'infanzia e disponibilità di risorse economiche

La sessione, inizialmente prevista per il 20 e 21 settembre a New York, è rinviata per gli attentati alle torri, ha avuto ora luogo tra l'8 e il 10 maggio. Tra gli impegni assunti, quello di destinare allo sviluppo almeno lo 0,7% del PIL dei Paesi ricchi in modo, tra l'altro, di consentire maggiori investimenti per la scuola e la sanità di base. Un commento a questo piano lo abbiamo già scritto (vedi editoriale M&B settembre, 2001). In proposito c'è da registrare che il nostro primo ministro, nonché ministro degli esteri, ha detto a Palermo il 5 aprile di quest'anno, suscitando l'entusiasmo dei terzomondisti, che l'Italia avrebbe destinato quanto prima fino all'1% del proprio PIL per gli aiuti ai Paesi in via di sviluppo (attualmente tale quota è lo 0,15%, una delle più basse in Europa). Tuttavia lo stesso ministro degli esteri, nonché primo ministro, tre settimane prima aveva firmato in sede UE l'impegno a raggiungere lo 0,33%... nel 2006. Tre diversi impegni: quale sarà quello vero?

(Fonte: www.unicef.org e varie agenzie di stampa)

Particolato sospeso e salute

I particolati presenti nell'atmosfera inquinata delle nostre città, una volta inalati, non restano nei tessuti polmonari ma penetrano in circolo, raggiungendo in breve tempo tutti gli organi. Questo, secondo i ricer-

catori dell'Università Cattolica di Leuven, in Belgio, può essere l'anello che mancava per spiegare l'effetto deleterio degli inquinanti sul sistema cardiovascolare. Lo hanno verificato direttamente, visualizzando come in una scintigrafia il passaggio dall'aria inspirata al sangue e ai tessuti di particelle simili a quelle inquinanti, legate a un isotopo radioattivo. Si tratta senza dubbio di un riscontro sorprendente, perché si era sempre pensato che la barriera tra polmoni e sangue consentisse il passaggio solo a gas e vapori ma fosse impermeabile alle particelle. Cinque volontari sani, di età compresa tra i 24 e i 50 anni, hanno inalato un aerosol contenente particelle di carbonio ultrafini (del tutto simili alle frazioni ultrafini dei particolati inquinanti), legate al tecnecio-99. Subito dopo, i soggetti sono stati esaminati con una gamma-camera e sottoposti, nel frattempo, a diversi prelievi di sangue per un'analisi cromatografica, da cui è emersa con chiarezza la rapida, e purtroppo efficace, immissione delle particelle nella circolazione. La radioattività è presente in circolo già un minuto dopo l'inalazione dell'aerosol, raggiunge il massimo dopo 10 o 20 minuti e rimane su alti livelli per almeno un'ora.

(Fonte: Zadig www.zadig.it)

Armi in libertà

Negli USA si registrano più di 28.000 decessi all'anno (accidentali, o intenzionali) per arma da fuoco, il tasso di gran lunga più alto nei Paesi cosiddetti sviluppati. Sempre negli

USA, le lesioni da arma da fuoco costituiscono la prima causa di decesso tra i 15 e i 24 anni, quindi più degli incidenti, e la terza causa al di sotto dei 15 anni. Il tasso di omicidi per arma da fuoco negli USA è 15 volte quello del Canada, dove il background culturale economico ed etnico è simile, ma la legislazione sul possesso di armi è alquanto diversa. In generale, il tasso di lesioni per arma da fuoco correla bene con la quota di famiglie che hanno armi in casa. Per esempio, il tasso di letalità causa-specifico di morte per arma da fuoco in Inghilterra è di 0,3 per 100.000 mentre negli USA è 10,6. Le famiglie dove si tengono armi hanno probabilità molto più alte di avere sia omicidi che suicidi nel loro ambito. Questi dati suggeriscono che le morti da arma da fuoco possono essere controllate dalla legislazione sull'acquisto e il porto d'armi. L'articolo completo è stato inviato per conoscenza al Ministro Martino, che recentemente ha ipotizzato una liberalizzazione maggiore del porto d'armi in Italia.

(Fonte: British Medical Journal, 27 aprile 2002)

Avviso ai neonatologi

Un bambino di 5 giorni è deceduto il 16 marzo in Belgio per meningite da *Enterobacter sakazakii* acquisita tramite un latte formulato (Nestlé Beba). La Nestlé ha prontamente ritirato il lotto di latti in Belgio, Svizzera e Lussemburgo. L'evento non è eccezionale: il mese scorso la US Food and Drug Administration ha reso noto che

Enterobacter sakazakii è stato ritrovato nel 14% dei campioni di latte analizzati (di varie case produttrici), dopo che un simile caso era stato registrato in un prematuro, e aveva raccomandato di non usare formule in polvere per prematuri, in quanto tali formule non garantiscono la sterilità, e i prematuri possono essere a maggior rischio di infezione. Il caso belga si è però verificato in un bambino a termine, apparentemente normale. Il problema andrà approfondito da parte di clinici, microbiologi ed epidemiologi; le case produttrici dovranno adeguare etichettatura e messaggi di marketing.

(Fonte: IBFAN www.ibfan.org/english/news/press/press10may02.html)

... e agli intensivisti

Completiamo le note allarmistiche con la segnalazione, non sappiamo quanto nota agli addetti ai lavori, della tossicità degli ftalati (precisamente del DEHP, di-2-etilhexil-ftalato) contenuti come ammorbidenti del PVC, largamente utilizzato per cannule, cateteri ecc. Il rischio (cancerogenesi) può essere particolarmente alto per neonati patologici, sottoposti al contatto con tali sostanze per settimane o mesi. Ricordiamo che sugli ftalati in generale (usati anche in oggetti di largo uso come tefal, giocattoli ecc.) pendono un bando temporaneo dell'UE in attesa di più approfondite conoscenze scientifiche.

(Fonte: monografia a cura di Muelberger e Rossi, 2000, disponibile presso Giorgio Tamburlini su richiesta)