

## Simulazioni di Dinamica Molecolare mediante Calcolo ad Alte Prestazioni (HPC) per identificare le interazioni tra PM2.5 e SARS-CoV-2 nell'ambito del progetto Pulvirus

Roberto Pellegrini<sup>1,2</sup>, Alice Romeo<sup>2</sup>, Maurizio Gualtieri<sup>3</sup>, Milena Straquadanio<sup>3</sup>, Federico Iacovelli<sup>2</sup>, Barbara Benassi<sup>1</sup>, Mattia Falconi<sup>2</sup>, Carmela Marino<sup>1</sup>, Gabriele Zanini<sup>3</sup>, Caterina Arcangeli<sup>1,\*</sup>

<sup>1</sup> *Laboratorio Salute e Ambiente, Divisione Tecnologie per la Salute, Dipartimento Sostenibilità dei Sistemi Produttivi e Territoriali, ENEA C.R Casaccia, Roma*

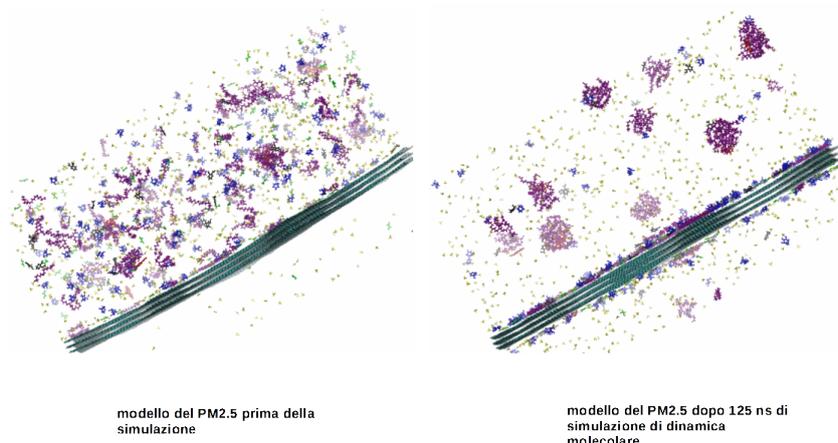
<sup>2</sup> *Centro di Biologia Strutturale, Dipartimento di Biologia, Università degli Studi di Tor Vergata, Roma*

<sup>3</sup> *Laboratorio Inquinamento Atmosferico, Divisione Modelli e Tecnologie per la Riduzione degli impatti antropici e dei rischi naturali, Dipartimento Sostenibilità dei Sistemi Produttivi e Territoriali, ENEA C.R Bologna, Bologna*

\* *Corresponding author. Tel: +3906304868, E-mail: caterina.arcangeli@enea.it*

**Keywords:** *In silico; Inquinamento; Bioinformatica Strutturale; HPC; Covid-19*

La possibilità che il particolato atmosferico possa agire da carrier/vettore nella trasmissione aerodispersa del virus SARS-CoV-2 è ancora oggi oggetto di acceso dibattito. Tra i diversi aspetti affrontati dal progetto Pulvirus ([www.pulvirus.it](http://www.pulvirus.it)), nato dall'alleanza scientifica fra ENEA, Istituto Superiore di Sanità (ISS) e Sistema Nazionale per la Protezione Ambientale (SNPA), c'è anche quello di delucidare la possibile associazione tra il particolato atmosferico e il bioaerosol attraverso il quale si trasferisce il virus SARS-CoV-2. Per rispondere a questa domanda, in Pulvirus, si è adottato anche un approccio *in silico*, qui descritto con i primi modelli strutturali ottenuti mediante tecniche di bioinformatica strutturale.



*Modello strutturale di un frammento di aerosol secondario all'inizio (a sinistra) e dopo 125 ns di simulazione di dinamica molecolare condotta con calcolo ad alte prestazioni (a destra).*

In questo contributo presentiamo la strategia adottata in Pulvirus per la realizzazione dei modelli strutturali di un frammento del virione di SARS-CoV-2 e di un frammento di PM<sub>2.5</sub> mediante simulazioni di dinamica molecolare e utilizzando le risorse computazionali della infrastruttura ENEA CRESCO/ENEAGRID High Performance Computing Infrastructure.

I risultati di questi studi, in via di elaborazione definitiva, consentiranno di comprendere non solo i meccanismi di riconoscimento, se presenti, tra le proteine di superficie del virus e le componenti organiche ed inorganiche del aerosol ma anche i possibili effetti del PM sulla integrità del virus e in particolare delle glicoproteine di membrana che hanno un ruolo fondamentale nel riconoscimento della cellula ospite.