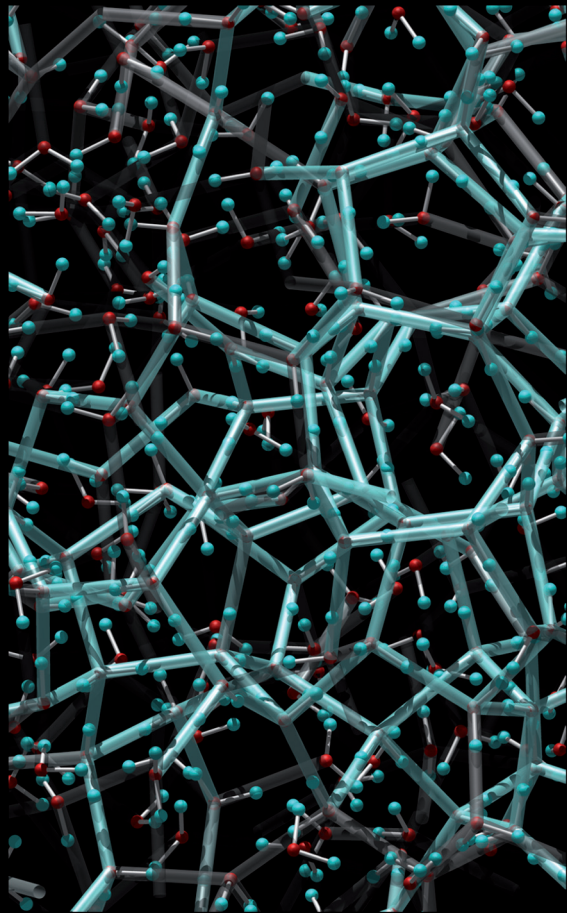
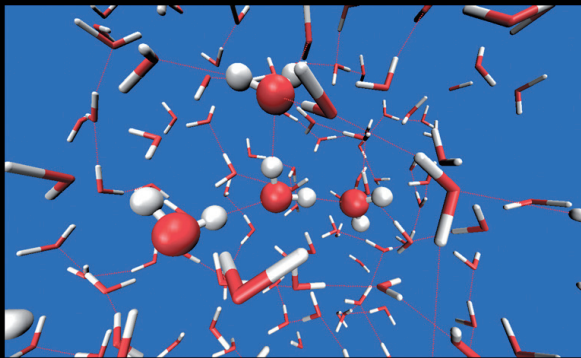




## SIMULAZIONE DI DINAMICA MOLECOLARE

Fermi immagine da simulazioni di dinamica molecolare dell'interazione tra molecole d'acqua. Nell'immagine a destra, tratta da una simulazione realizzata da Masakazu Matsumoto (Research Center for Materials Science, Nagoya University in Giappone), le molecole stanno saldandosi a formare il reticolo cristallino caratteristico dello stato solido. Nell'immagine in basso, tratta da una simulazione "da principi primi" realizzata da Omololu Akin-Ojo (Condensed Matter and Statistical Physics, International Centre for Theoretical Physics, Trieste), le molecole stabiliscono legami a idrogeno con tre o quattro altre molecole, secondo il modello teorico più accreditato.



**L**e immagini scientifiche e non scientifiche (grazie anche alla loro "riproducibilità tecnica", per ricordare un famoso testo di Walter Benjamin) stanno accrescendo vertiginosamente la conoscenza che abbiamo di questo mondo, sia trasmettendoci nuove informazioni su posti e cose che non avremmo mai potuto vedere, sia rielaborando in modo intelligente la massa dei dati che continuiamo a raccogliere, offrendocene una sempre migliore visualizzazione. Se le guardiamo con occhio critico e con le dovute istruzioni, le immagini scientifiche possono però anche mostrarci quanto poco ancora sappiamo del mondo: ed è quanto abbiamo cercato di fare in queste pagine, sforzandoci di indicare, assieme alle indiscusse possibilità, anche i limiti delle nuove tecniche di imaging.

Le figure inquadrano fermi immagine casuali dalla visualizzazione di simulazioni di dinamica molecolare. L'immagine a sinistra è an-

che una simulazione "da principi primi", cioè secondo i principi della meccanica quantistica, realizzata calcolando il variare delle forze interatomiche che determinano le interazioni tra le molecole, partendo solo dalla struttura elettronica del sistema simulato. Dei limiti della dinamica molecolare e delle sue simulazioni abbiamo già parlato altre volte (ottobre 2008, giugno 2012). In questo numero, invece di tornare sul tema della tecnica, cogliamo l'occasione del contenuto delle immagini per fare alcune considerazioni più generali. Le strutture rappresentate definiscono i rapporti tra le molecole dell'elemento più comune e più caratteristico del nostro pianeta: l'acqua allo stato liquido. Allo stato solido, le molecole d'acqua stabiliscono legami molto forti ognuna con quattro altre molecole. Si tratta di legami detti "a idrogeno" o "ponti idrogeno", perché consistono nello scambio di atomi di idrogeno tra le molecole che li formano. Ogni molecola d'acqua, costituita da due

atomi di idrogeno e uno di ossigeno, "dona" due atomi di idrogeno a due molecole vicine e riceve due atomi di idrogeno da altre due. Si produce così un reticolo cristallino che corrisponde alla formazione del ghiaccio. Allo stato liquido, invece, le cose non sono così chiare. Le molecole d'acqua, secondo il modello teorico più accreditato, invece di legarsi con quattro altre, a volte formano legami a idrogeno soltanto con tre. Recentemente, a partire da dati sperimentali, è stato anche proposto un modello in cui allo stato liquido ogni molecola d'acqua sarebbe legata soltanto a due altre molecole.

Quando guardiamo l'acqua, possiamo perciò ricordare che anche gli scienziati che possono studiare la struttura atomica con tutti gli strumenti di calcolo che si possono desiderare, non sono ancora riusciti a decidere in che modo interagiscano le sue molecole. Le cose più semplici sono anche le più misteriose.



### QUANTI HIKIKOMORI TRA DI NOI?

Già nel 1996, la statunitense Kimberly Young (*Internet Addiction: The Emergence of a New Clinical Disorder. CyberPsychology & Behavior* 1996;3:237-44) aveva descritto una forma di dipendenza da Internet nota con l'acronimo di IAD, *Internet Addiction Disorder*. La IAD è una delle ultime forme delle cosiddette "dipendenze senza sostanze". I sintomi allora descritti erano quelli classici delle patologie da dipendenza, quali desiderio incontrollabile, sintomi astinenziali, isolamento, perdita di controllo, e conseguenti problemi sociali, coniugali, prestazionali, scolastici o lavorativi.

Ora, per lo IAD, o IUD (*Internet-Use Disorder*), che vale per tutte le apparecchiature che consentono una connessione, inclusi quindi gli smartphones e i tablet, è stato recentemente proposto dalla Australian Psychological Society e da altri gruppi di esperti l'inserimento nella nuova classificazione delle malattie mentali (DSM). Da ogni parte del mondo si segnala un aumento esponenziale di tali casi in età molto giovani, preadolescenza e adolescenza. In Giappone gli adolescenti afflitti da tale disturbo, che comporta una dissociazione progressiva dalla realtà, l'auto-reclusione in casa e l'incapacità di non restare connessi per gran parte del tempo sono particolarmente numerosi (un milione) e vengono chiamati gli "hikikomori" (i reclusi). In Italia il fenomeno è riferito con crescente frequenza da psicologi, operatori dei SERT e neuropsichiatri infantili ed è stato descritto da Federico Tonioni, uno psichiatra del Gemelli, in un volume uscito nel 2011 per Einaudi (*Quando internet diventa una droga*).

Per prevenirlo, si propongono varie strategie, dagli approcci comportamentali (il "venerdì senza e-mail" o messaggi o connessioni, proposto negli Stati Uniti e che lascia perplessi) a iniziative volte a creare consapevolezza tra tutti gli attori in campo (ragazzi, insegnanti, famiglie) come ci si è proposti di fare con una iniziativa pilota in Friuli Venezia Giulia (vedi anche Editoriale di questo stesso numero).

### CRESCE IN MODO PREOCCUPANTE L'ANTIBIOTICO-RESISTENZA

L'OMS riporta con crescente frequenza e preoccupazione l'aumento delle antibiotico-resistenze. Sono stimati in 440.000 i nuovi casi, in un anno, di "multidrug-resistant tuberculosis (MDR-TB)" causa di almeno 150.000 decessi (vedi *Figura*). La resistenza agli antimalarici di prima generazione quali la cloroquina e la sulfadossina-pirimetamina è ormai diffusissima nella gran parte delle zone endemiche. Negli ospedali di tutto il mondo, una crescente proporzione delle infezioni ospedaliere è causata da *Staphylococcus aureus* meticillino-resistente (MRSA). La resistenza alla ciprofloxacina, attualmente l'antibiotico di scelta per il trattamento della dissenteria da *Shigella* visto che ormai gran parte degli altri antibiotici sono ormai inefficaci, aumenta rapidamente rendendo urgente l'identificazione di nuove molecole. Infine, anche le infezioni da *Neisseria gonorrhoeae* richiedono spesso il ricorso a cefalosporine di ultima generazione e nuovi meccanismi di resistenza, come la beta-lattamasi NDM-1, emergono tra i Gram-negativi.

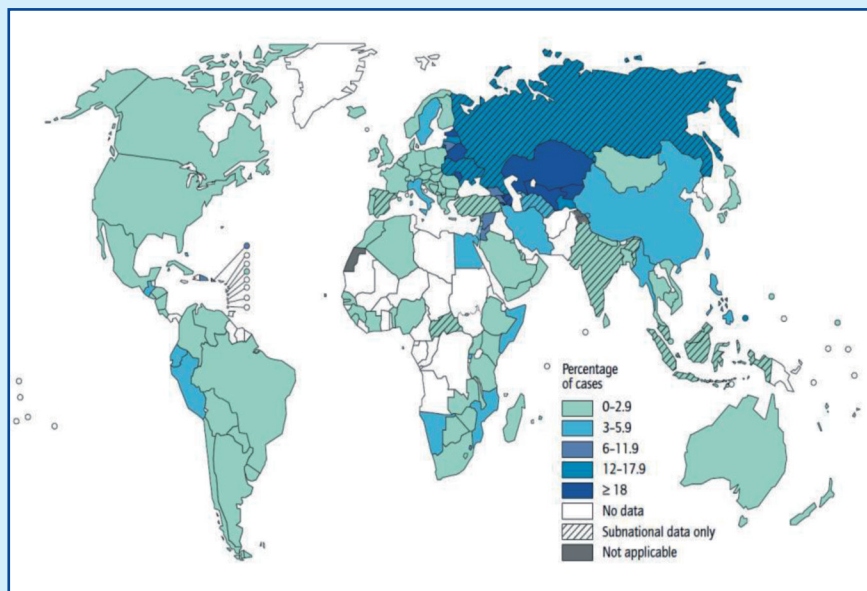
La preoccupazione è grande tra gli esper-

ti sia perché molte infezioni diventano intrattabili sia per l'aumento dei costi e il rapido esaurimento delle armi a disposizione per il controllo di malattie quali la tubercolosi. Le cause sono molteplici e hanno a che fare con l'enorme e spesso irrazionale uso di antibiotici nell'uomo, come pure negli animali da allevamento. Cicli troppo brevi di antibiotici, o, più spesso, auto-sospensioni precoci degli stessi sono una causa di resistenze poco riconosciuta e importante agli effetti pratici almeno quanto la prescrizione senza vera indicazione (che peraltro spesso ha come conseguenza proprio l'interruzione dopo due, tre giorni). C'è qualcosa, quindi, che si può fare e raccomandare anche nella pratica clinica quotidiana, da parte di medici, farmacisti, e operatori che prestano servizio a domicilio.

### PARTE RADIO MAGICA!

Il 10 dicembre scorso ha iniziato la sua attività Radio Magica, portale, web radio e biblioteca online per bambini di ogni età, genitori, educatori. Fiabe, musica, arte, buone pratiche di cura e tante altre cose, accessibili in diretta e in differita. Non perdetela!

([www.radiomagica.org](http://www.radiomagica.org))



Proporzione di nuovi casi di tubercolosi multiresistente, in percentuale su 100 nuovi casi (fonte: OMS, 2011).