Toolkit macht Proteindesign schneller und leichter zugänglich

Der Damietta Server erweitert die Zugänglichkeit der Proteindesignforschung und ihre Anwendung in verschiedenen biotechnologischen und biomedizinischen Bereichen. Forscher am Max Planck Institut für Biologie Tübingen, der Universität Tübingen und des Universitätsklinikums Tübingen haben ein internetbasiertes Toolkit entwickelt, um Proteindesign schneller und einfacher zu machen. Hierzu braucht man als Nutzer keine große Rechnerkapazität oder extensive Erfahrung im Bereich des Proteindesigns.

Das Toolkit bietet seinen Nutzern vielfältige Designtools, schnelle Analysen, einfache Interpretation und Resultate zum herunterladen. Das Rahmenprogramm wurde in Nucleic Acids Research veröffentlicht und bietet eine umfassende Ressource für die biologische Forschergemeinschaft.

Proteine mit neuer Funktion zu konstruieren ist ein entscheidender Schritt in vielen Bereichen der biomedizinischen Forschung. Der Vorgang des Proteindesigns war oft ein komplexer Vorgang, der eine große Rechnerkapazität und viel Erfahrung erforderte. Dies schränkte die Anwendbarkeit und Zugänglichkeit von Proteindesign für eine breiteres Spektrum von Forschern ein.

Das Damietta Protein-design Toolkit geht diese Herausforderungen an, indem es eine webbasierte Plattform anbietet, die mehrere Proteindesign Tools integriert. Diese Plattform wurde inspiriert durch das MPI-Bioinformatik-Toolkit. Dies vereinfacht Arbeitsabläufe in der Bioinformatik signifikant und wird von der Abteilung für Proteinevolution am Max-Planck-Institut für Biologie Tübingen unter der Leitung von Prof. Andrei Lupas betrieben. Er hat ebenso die Entwicklung des neuen Protein-Design-Toolkits unterstützt.

„Die benutzerfreundliche Oberfläche von Damietta macht es zu einem leistungsstarken Werkzeug für Forscher aller Erfahrungsstufen“, sagt Dr. Kateryna Maksymenko. Sie ist Forscherin in der Abteilung für Proteinevolution am MPI für Biologie Tübingen. „Dieses Toolkit beschleunigt maßgeblich die Konstruktion von Proteinen, und fördert so Entdeckungen und direkte Anwendungen im biomedizinischen Bereich.“

Im Gegensatz zu Methoden, die auf maschinellem Lernen basieren, stützt sich Damietta auf etablierte physikalische Prinzipien und gewährleistet so, daß die Ergebnisse verallgemeinbar, genau und interpretierbar sind.

Der Damietta Server vereinfacht für den Nutzer den Prozeß des Proteindesigns indem er folgendes liefert:

- Schnellere und genauere Berechnung. Was zuvor Wochen dauerte, braucht nun nur noch ein Tag oder weniger.
- Intuitive grafische Oberfläche, die es auch Forschern mit wenig Erfahrung im Proteindesign ermöglicht das Toolkit effektiv zu nutzen.
- Verbesserte Transparenz, dadurch daß klare und interpretierbare Ergebnisse geliefert werden. Sie ermöglichen es den Forschern, die zugrundeliegenden physikalischen Interaktionen zu verstehen, die das konstruierte Protein beeinflußen.

Größeres Potenzial für neue biomedizinische und therapeutische Anwendungen

Bisher, hat die Damietta-Software ihre Wirksamkeit beim Entwurf von zwei Klassen von Proteinen für die Krebsbehandlung unter Beweis gestellt. Das Team nutzt die Software auch, um Proteine zu entwickeln, die bei verschiedenen Erkrankungen hilfreich sind, z. B. bei Knochenmarkversagen und Leukämie.

Derzeitige Nutzer können sich auf künftige Updates freuen, da die Forscher Damietta aktiv weiterentwickeln. Es soll möglich werden eine Membranumgebung und nicht standardisierte Aminosäuren und kleine Moleküle einzubeziehen.

31.05.2024
Quelle: Max-Planck-Gesellschaft zur Förderung der Wissenschaften e.V.

Weitere Informationen

- Max-Planck-Institut für Biologie Tübingen
- Damietta protein design toolkit