

Pressemitteilung

Johannes Gutenberg-Universität Mainz

Petra Giegerich

13.07.2022

<http://idw-online.de/de/news798394>

Forschungsergebnisse, Wissenschaftliche Publikationen
Biologie, Chemie, Informationstechnik, Physik / Astronomie
überregional



Die komplexesten Knoten in Proteinen

Theoretische Physiker der Johannes Gutenberg-Universität Mainz stellen Googles künstliche Intelligenz AlphaFold auf die Probe und finden die bisher komplexesten Proteinknoten

Die Frage danach, wie die chemische Zusammensetzung eines Proteins dessen 3-D-Struktur bestimmt, ist schon seit über einem halben Jahrhundert eine der größten Herausforderungen der Biophysik. Dieses Wissen um die sogenannte „Faltung“ von Proteinen ist zu Recht heiß begehrt, denn es trägt unter anderem maßgeblich zum Verständnis diverser Krankheiten und deren Behandlung bei. Aus diesen Gründen hat Googles Forschungsteam DeepMind die künstliche Intelligenz AlphaFold entwickelt, welche 3-D-Strukturen vorhersagt.

Ein Team bestehend aus Forschern der Johannes Gutenberg-Universität Mainz (JGU) und der University of California, Los Angeles, hat sich diese Strukturen nun etwas genauer angeschaut und auf Verknotungen untersucht. Knoten kennen wir vor allem von Schnürsenkeln und Kabeln – doch treten sie auch mikroskopisch klein in unseren Zellen auf. Verknotete Proteine können nicht nur zur Einschätzung der Güte der Vorhersagen herangezogen werden, sondern werfen darüber hinaus wichtige Fragen zu Faltungsmechanismen und der Evolution von Proteinen auf.

Die komplexesten Knoten als Test für AlphaFold

„Wir haben alle, nämlich einige 100.000 Vorhersagen von AlphaFold numerisch nach neuen Proteinknoten durchsucht“, sagt Maarten A. Brems, Doktorand in der Gruppe von Dr. Peter Virnau an der JGU. Ziel war es, seltene, qualitativ hochwertige Strukturen zu identifizieren, welche komplexe und bisher unbekannte Proteinknoten enthalten, um eine Basis für die experimentelle Verifizierung von AlphaFolds Vorhersagen zu schaffen. Bei der Untersuchung wurde nicht nur das bisher am komplexesten verknotete Protein gefunden, sondern auch die ersten Kompositknoten in Proteinen. Letztere kann man sich vorstellen wie zwei getrennte Knoten in der gleichen Schnur. „Diese neuen Entdeckungen geben außerdem Einsicht in die evolutionären Mechanismen hinter solchen seltenen Proteinen“, ergänzt der theoretische Physiker Robert Runkel, der ebenfalls am Projekt beteiligt war. Die Resultate wurden jetzt im Journal Protein Science veröffentlicht.

Über die Ergebnisse freut sich auch Peter Virnau: „Wir haben bereits eine Kollaboration mit unserem Kollegen Todd Yeates von der UCLA etabliert, um diese Strukturen experimentell zu bestätigen. Diese Forschungsrichtung wird den Blick der Biophysik-Community auf die künstliche Intelligenz prägen und wir sind glücklich, einen Experten wie Dr. Yeates dabei zu haben.“

Bildmaterial:

<https://download.uni-mainz.de/presse/o8.physik.komet.proteine.knoten.jpg>

Der komplexeste Proteinknoten mit sieben Überkreuzungen (l.), vorhergesagt durch AlphaFold, und eine vereinfachte Darstellung (r.)

Abb./©: Maarten Brems, CC BY 4.0

Weiterführende Links:

<https://www.komet1.physik.uni-mainz.de/> - Statistische Physik und Theorie der Weichen Materie am Institut für Physik

Lesen Sie mehr:

<https://www.uni-mainz.de/presse/aktuell/15662.DEU.HTML.php> - Pressemitteilung „Hindernislauf der mikroskopischen Hurrikans“ (07.06.2022)

<https://www.uni-mainz.de/presse/aktuell/13181.DEU.HTML.php> - Pressemitteilung „Magnetische Wirbel auf engstem Raum“ (03.03.2021)

<https://www.uni-mainz.de/presse/aktuell/12071.DEU.HTML.php> - Pressemitteilung „Magnetische Wirbel kristallisieren in zwei Dimensionen“ (09.09.2020)

<https://www.uni-mainz.de/presse/aktuell/3056.DEU.HTML.php> - Pressemitteilung „Forscher finden Hinweise auf verknotete Chromosomen im Erbgut“ (20.10.2017)

<https://www.uni-mainz.de/presse/61081.php> - Pressemitteilung „Aktive Teilchen können Phasenübergang erleichtern“ (12.06.2014)

<https://www.uni-mainz.de/presse/61249.php> - Pressemitteilung „DNA-Knoten können durcheinander durchdiffundieren und Plätze tauschen“ (03.07.2014)

<https://www.uni-mainz.de/presse/60685.php> - Pressemitteilung „Computersimulationen für Grenzflächenberechnungen verbessert“ (15.05.2014)

wissenschaftliche Ansprechpartner:

PD Dr. Peter Virnau

Statistische Physik und Theorie der Weichen Materie

Institut für Physik

Johannes Gutenberg-Universität Mainz

55099 Mainz

Tel. +49 6131 39-20493

Fax +49 6131 39-20496

E-Mail: virnau@uni-mainz.de

<https://www.komet1.physik.uni-mainz.de/people/peter-virnau/>

Originalpublikation:

John Jumper et al.

Highly accurate protein structure prediction with AlphaFold

Nature, 15. Juli 2021

DOI: [10.1038/s41586-021-03819-2](https://doi.org/10.1038/s41586-021-03819-2)

<https://www.nature.com/articles/s41586-021-03819-2>

Maarten Brems, Robert Runkel, Todd Yeates, Peter Virnau

AlphaFold predicts the most complex protein knot and composite protein knots

Protein Science, 13. Juli 2022

DOI: [10.1002/pro.4380](https://doi.org/10.1002/pro.4380)

<https://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/pro.4380>