

Befund TRP-cage

Zum Vergleich bioinformatischer und metasytemischer Strukturprognosen

Erstmals Proteinfaltung allein aus der Aminosäure-Sequenz korrekt berechnet

Stony Brook (USA) - Sozusagen allein aus dem Blick auf die Bausteine konnten US-Forscher die Form des fertigen Hauses berechnen. Auf Proteine übertragen heißt das, dass sie aus der Abfolge der so genannten Aminosäuren die dreidimensionale Form des fertigen Eiweißes errechnen konnten. Dies ist möglich, weil bekannt ist, wie sich die einzelnen Aminosäuren anziehen oder abstoßen, wenn sie sich im Raum begegnen. Trotzdem erfordert dies eine immense Rechenarbeit -- erstmals gelang die Vorhersage jetzt an einem besonders kurzen künstlichen Protein. Die Berechnung stimmte beinahe exakt mit dem wirklichen Eiweißmolekül überein. Aus nur 20 Aminosäuren besteht das Protein namens Trp-cage, das sich Carlos Simmerling und Kollegen der State University of New York at Stony Brook vornahmen. Das künstliche Protein war im vergangenen Jahr von Forschern aus Washington entwickelt worden, seine Aminosäure-Kette faltet sich in ein kompaktes dreidimensionales Knäuel. In einer solchen Form treten Proteine im Körper auf, sie bestimmt auch ihre Funktion im Körper, nämlich über Wechselwirkungen mit anderen "Bewohnern": Nach dem Schlüssel-Schloss-Prinzip passen einige Substanzen ans Protein, bei falscher 3D-Struktur passen sie nicht mehr, die Wirkung bleibt aus. Bisher waren langwierige experimentelle Aufbauten noch immer der beste Weg, um die Positionen der einzelnen Aminosäuren zueinander herauszufinden. Computersimulationen, um alle wirkenden Kräfte zu berechnen, waren bislang nie bis zur fertigen dreidimensionalen Form gelangt. Mit der Länge der Aminosäure-Kette ufert die Berechnung schnell aus, dass sie für heutige Computer zu komplex ist.

Metasystemische Raumprognose: auf Grund der 3D Algorithmen des Farbraums PerZan (FR64) kann man systemeigene Modell - (de novo) Prognosen erstellen und mit den i.d.R. kristallografischen Verfahren vergleichen. Dabei gibt es bereits zahlreiche durchaus stimmige Korrelationen und Raum-Imaginationen, die gemeinsam über das pdb-Programm visualisiert werden können.

[1L2YA](#). Reports Chain A, Nmr Stru...[gi:21465974] [BLink](#), Links LOCUS 1L2Y_A 20 aa linear SYN 25-FEB-2002
 DEFINITION Chain A, Nmr Structure Of Trp-Cage Miniprotein Construct Tc5b. VERSION 1L2Y_A GI:21465974

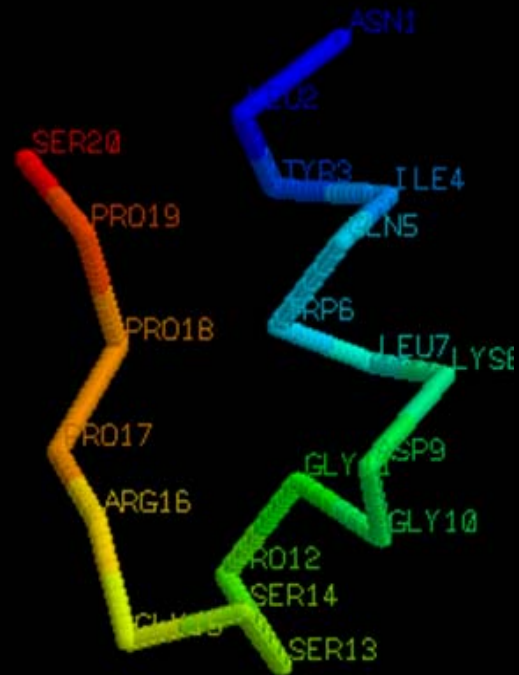
n l y i q w l k d g g p s s g r p p p s << synth.AS-Sequenz

- aac tta tac ata caa tgg tta aaa gac gga gga cca tca tca gga aga cca cca cca tca
- aat ttg tat atc cag tgg tta aag gat ggc ggc ccg tcg tcg ggc agg ccg ccg ccg tcg
- aac cta tac att caa tgg cta aag gac ggt ggt ccc tcc tcc ggt agc ccc ccc ccc tcc
- aac ctg tac atc caa tgg ctg aag gac ggg ggg cct tct tct ggg agt cct cct cct tct
- aac tct tac atc caa tgg tct aag gac ggc ggc ccg agc agc ggc cga ccg ccg cct agc
- aac ctt tac atc caa tgg ctt aag gac ggc ggc ccg agt agt ggc ccg ccg ccg cct agt

<< mögl. Triplet- Kombinationen

A t t at A T t A g t t a ta ta t A a a a ta << mögl. Condensed Values

pdb-Version Original Faltung



pdb-Version Metasystem var. 5



Var.6



Var.4

