

# **BIOWEPRO**

## **Biomolekulare Wechselwirkungen von Proteinen<sup>1</sup>**

### **Teilprojekt Generierung und Bewertung von diskreten Dockingpositionen & Proteindocking mit Korrelationsmethoden**

Dietmar Schomburg, Michael Meyer

Gesellschaft für Biotechnologische Forschung, Molekulare Strukturforchung

Mascheroder Weg 1, 38124 Braunschweig

#### **Kurzfassung**

Das Projekt BIOWEPRO als Kooperationsprojekt der Arbeitsgruppe um Prof. Schomburg mit den Gruppen Prof. Sagerer, Universität Bielefeld, Technische Fakultät, Dr. Soumpasis, Max-Planck Institut für Biophysikalische Chemie Göttingen und Prof. Kriegel, Universität München, Institut für Informatik diente der Entwicklung von geeigneten Algorithmen und eines Datenbanksystems, das die effiziente Beantwortung der Frage nach den möglichen Wechselwirkungen eines gegebenen Moleküls bekannter Raumstruktur mit den in der Datenbank erfaßten Proteinen mit bekannter Faltung erlauben soll. Das hier beschriebene Projekt befaßt sich vornehmlich mit Protein-Protein Wechselwirkungen, wobei sich während der Projektbearbeitung gezeigt, hat, daß mit den erarbeiteten Methoden auch Nichtprotein-Anfragemoleküle von mindestens ca. 20 Nichtwasserstoffatomen erfolgreich bearbeitet werden können. Die Projektteilbereiche der Datenbankkonstruktion, der Grobidentifizierung von Docking-Bereichen und der Feinbestimmung der Komplexstruktur von Proteinkomplexen konnten im Gesamtprojekt erfolgreich abgeschlossen werden, wobei deutlich effizientere und zuverlässige Methoden als bisher in der Literatur beschrieben, entwickelt werden konnten. Hierbei wird im Normalfall ein beliebiger experimentell bestimmter Komplex eines Proteins mit ca. 0.5-1.5 Å Genauigkeit reproduziert.

---

<sup>1</sup> *Das diesem Bericht zugrundeliegende Vorhaben wurde mit Mitteln des Bundesministeriums für Forschung und Technologie unter dem Förderkennzeichen 01 IB 307 A7 gefördert. Die Verantwortung für den Inhalt dieser Veröffentlichung liegt beim Autor.*