

[Akceptuje](#)

W ramach naszej witryny stosujemy pliki cookies w celu świadczenia państwu usług na najwyższym poziomie, w tym w sposób dostosowany do indywidualnych potrzeb. Korzystanie z witryny bez zmiany ustawień dotyczących cookies oznacza, że będą one zamieszczone w Państwa urządzeniu końcowym. Możecie Państwo dokonać w każdym czasie zmiany ustawień dotyczących cookies. Więcej szczegółów w naszej [Polityce Prywatności](#)

[Portal](#) [Informacje](#) [Katalog firm](#) [Praca](#) [Szkolenia](#) [Wydarzenia](#) [Porównania międzylaboratoryjne](#)
[Kontakt](#)



[Laboratoria](#)
[.net](#)
[Innowacje](#)
[Nauka](#)
[Technologie](#)

[Logowanie](#) [Rejestracja](#) [pl](#)

Newsletter

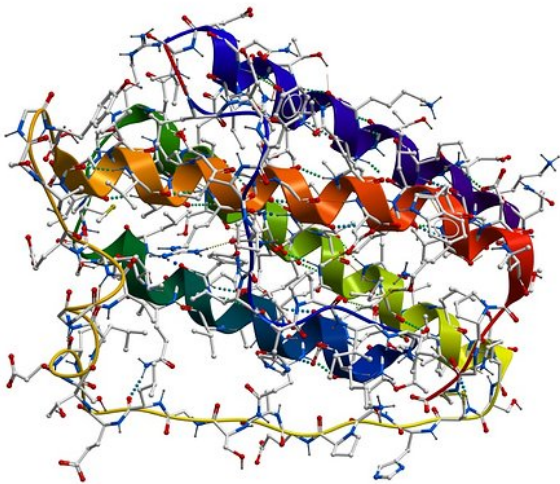
zapisz się



- [Nowe technologie](#)
- [Felieton](#)
- [Tygodnik "Nature"](#)
- [Edukacja](#)
- [Artykuły](#)
- [Przemysł](#)

[Strona główna](#) > [Tygodnik "Nature"](#)

Bazy danych pękają w szwach w miarę rozwoju obrazowania protein



Metody hybrydowe przybliżające struktury maszyn molekularnych okazują się wyzwaniem dla baz danych.

Biologia strukturalna oraz mapowanie złożonych biologicznych molekuł (na przykład białek) przechodzą obecnie swoistą rewolucję. Obszar ten był od dawna zdominowany przez krystalografię rentgenowską- technikę, która popularność zawdzięcza swojej nieocenionej roli w dekodowaniu podwójnej helisy DNA w latach 50. ubiegłego wieku. Jednak potrzeba zajęcia się bardziej skomplikowanymi strukturami i chęć przyjrzenia się funkcjonowaniu „maszyn molekularnych” w czasie rzeczywistym są powodem zwrotu w kierunku obrazowania hybrydowego, które może tworzyć ruchome modele.

Stanowi to wyzwanie dla oficjalnego światowego magazynu struktur białkowych: PDB (Protein Data Bank), który polega prawie wyłącznie na danych krystalograficznych, a któremu brakuje standardów i oprogramowania aby archiwizować struktury opisane metodami hybrydowymi. W tym miesiącu, szefowie czterech światowych organizacji zajmujących się przechowywaniem danych zorganizowali warsztaty w Hinxton w Wielkiej Brytanii, aby opracować plan, który sprawi, że modele hybrydowe i zwarte w nich cenne dla fundamentalnej biologii informacje, nie zostaną zmarnowane.

W przeszłości biologia strukturalna skupiała się na tworzeniu trójwymiarowych (3D) opisów pojedynczych białek. W wielu przypadkach jest to zadanie idealne dla krystalografii, podczas której molekułę bombarduje się promieniami rentgenowskimi, a rozproszone promieniowanie ujawnia pozycję każdego atomu. Technika ta stoi u podłoża wielu odkryć uhonorowanych nagrodą Nobla.

Archiwizowanie struktur w scentralizowanym i nieodpłatnym PDB jest kluczowe, bo daje naukowcom możliwość odpowiedzi na pytania, które nawet nie przyszły na myśl ich odkrywcom. Większość czasopism publikuje struktury tylko wówczas, gdy są one także dostępne w PDB. W tym roku liczba zarejestrowanych struktur przewyższyła 100 000, z czego zdecydowaną większość stanowią dane krystalograficzne. (zob. [Nature 509, 260; 2014](#)).

Jednak w ostatniej dekadzie biologia strukturalna poszła szybko do przodu. Badacze teraz chcą opisać zawiłe struktury komórkowe złożone z dziesiątek albo i setek białek, które poruszają się względem siebie i wykonują zadania takie jak przetwarzanie protein czy kopiowanie chromosomów. Te molekularne maszyny nie mogą być umieszczone w nieruchomej, uporządkowanej maszynie do krystalografii. „W dzisiejszych czasach zajmowanie się krystalografią już nie wystarcza”, twierdzi Gerard Kleywegt, biolog strukturalny z European Bioinformatics Institute w Hinxton, który kieruje europejską gałęzią PDB.

“W dzisiejszych czasach zajmowanie się krystalografią już nie wystarcza.”

Metody hybrydowe aplikują podejście "wszystko może się przydać" do biologii strukturalnej, wcielając i łącząc różne techniki. Niektóre dają dynamiczny obraz maszyny molekularnej w ruchu, na przykład rezonansowy transfer energii mierzy odległość i interakcje między proteinami. Inne, jak na przykład mikroskopia krio-elektronowa, dostarczają szczegółów niemal na poziomie atomów bez konieczności krystalizacji. Programy komputerowe następnie integrują różne skrawki informacji, w tym dane krystalograficzne, aby stworzyć trójwymiarowy model, który możliwie najlepiej odzwierciedla próbkę.

Literatura naukowa naszpikowana jest teraz efektami podejścia hybrydowego. W 2012 roku, biolog strukturalny Andrej Sali z University of California w San Francisco oraz jego współpracownicy wykorzystali metody hybrydowe do opisanego struktury kompleksu proteasomu 26S ([K. Lasker et al. Proc. Natl Acad. Sci. USA. 109, 1380-1387; 2012](#)), który przetwarza proteiny i może funkcjonować nieprawidłowo przy chorobach takich jak Alzheimer. Naukowcy użyli modelu aby zidentyfikować odpowiednie leki, które wpływałyby na działanie proteasomu. W tym roku inna grupa badawcza opublikowała hybrydowy model kluczowych białek HIV, które transportują wirusa do komórki- może to pomóc w opracowaniu szczepionki. ([M. Pancera et al. Nature <http://doi.org/wfz>; 2014](#)).

Podejście hybrydowe zastosowano także do badania rybosomu, który produkuje proteiny; porowatego kompleksu komórkowego, który łączy genom w jądrze z resztą komórki oraz strzykawek molekularnych tworzonych przez bakterie, które wstrzykują proteiny do komórki. Można się spodziewać, że powstaną także modele wielu innych maszyn molekularnych. „Wkraczamy w okres wykładniczego wzrostu liczby struktur hybrydowych”, mówi Stephen Burley, biolog strukturalny z Rutgers University w Piscataway (New Jersey), który kieruje jednym z dwóch oddziałów amerykańskiego PDB.

Na warsztatach PDB, które odbywały się 6-7 października, Leywegt, Burley i ponad trzydzieści innych osób omawiali wyzwania, które te niewątpliwe sukcesy naukowe generują dla PDB. Krystalografia daje standaryzowane pliki danych, w których struktura i poziom precyzji są oczywiste. Z kolei dane hybrydowe zapisywane są w mieszance formatów, takich jak rentgenowskie wzory dyfrakcyjne czy elektronowe obrazy mikrograficzne. W tym przypadku przejście od surowych danych do modeli wymaga więcej kroków pośrednich niż w krystalografii. Podobnie wymaga ono więcej założeń, wiodących do zwiększenia możliwych sposobów interpretacji wyników.

Większość uczestników warsztatów zgodziła się, że kluczowa dla baz danych biologii strukturalnej będzie nie tylko możliwość zapisywania nieprzetworzonych danych hybrydowych, ale także złożonych z nich modeli, tak, aby naukowcy mogli je weryfikować i rozbudowywać. Jest jednak wiele pytań, na przykład jak przechowywać i przenosić zestawy danych, które są znacznie większe niż pliki krystalograficzne. Spotkanie skończyło się wspólnym planem pozyskania dofinansowania na nowy bank danych skoncentrowany na maszynach molekularnych, a także wybrania dla niego odpowiedniej nazwy.

„Koniecznym jest znalezienie sposobu na przechowywanie struktur hybrydowych, jeśli biologia strukturalna ma realizować swój potencjał”, mówi biolog komórkowy Jan Ellenberg z European Molecular Biology Laboratory w Heidelbergu (Niemcy), który stał na czele grupy badawczej, modelującej kompleks porowaty. Koniec końców, dodaje, „chcemy poznać strukturę molekularną całej komórki. W tym momencie to wciąż science-fiction, ale możemy dojść do tego za 10, 20 lat.”

Źródło: <http://www.nature.com/news/data-bank-struggles-as-protein-imaging-ups-its-game-1.16196>

<http://laboratoria.net/naturecom/22419.html>

Informacje dnia: [Ekrany dotykowe bez problematycznego indu Świat atomów i cząsteczek Żyjemy w czasach multitożsamości](#) [Dlaczego Polki rzadziej jedzą mięso niż Polacy? Co 3 osoba dorosła zagrożona chorobami z powodu braku ruchu](#) [Cynk może pomóc chronić uprawy przed zmianami klimatu](#) [Ekrany dotykowe bez problematycznego indu Świat atomów i cząsteczek Żyjemy w czasach multitożsamości](#) [Dlaczego Polki rzadziej jedzą mięso niż Polacy? Co 3 osoba dorosła zagrożona chorobami z powodu braku ruchu](#) [Cynk może pomóc chronić uprawy przed zmianami klimatu](#) [Ekrany dotykowe bez problematycznego indu Świat atomów i cząsteczek Żyjemy w czasach multitożsamości](#) [Dlaczego Polki rzadziej jedzą mięso niż Polacy? Co 3 osoba dorosła zagrożona chorobami z powodu braku ruchu](#) [Cynk może pomóc chronić uprawy przed zmianami klimatu](#)

Partnerzy