

Dresden/München, 06. April 2022

PRESSEMITTEILUNG

Neues KI-Tool ermöglicht eine schnelle und kostengünstige Protein-Markierung im Labor

Für die Erforschung von Wechselwirkungen zwischen Molekülen werden Farbstoffe zum Labeln genutzt. Die kostenlose Software von NanoTemper und PharmAI verrät, welcher Stoff am besten passt.

Wechselwirkungen zwischen Proteinen steuern biologische Prozesse im menschlichen Körper. Einblicke in genau diese Vorgänge sind notwendig, um Krankheiten zu verstehen und neue Medikamente entwickeln zu können. Im Labor wird deshalb die Bindungsneigung von Molekülen zu Proteinen gemessen. Für den Nachweis und die Messung dieser Interaktion ist eine Markierung nötig, meist mit Hilfe eines Farbstoffs. Doch dieser kann die Bindung ungünstig beeinflussen. Wichtig wäre es also zu wissen, welcher Farbstoff die Messung am wenigsten stört. Das Dresdner Start-up PharmAI und das Münchner Unternehmen NanoTemper Technologies haben dafür nun das gemeinsame Tool „Proto“ entwickelt. Es spart Zeit und Kosten.

NanoTemper Technologies ist seit Jahren führend in der Entwicklung von Geräten und Software-Lösungen für die Untersuchung von Biomolekülen. PharmAI ist spezialisiert auf KI-gestützte Software zur Analyse von 3D-Proteinstrukturen. Zusammen erarbeiteten sie nun eine KI-basierte Anwendung, die Forschende beim effektiven Markieren unterstützt. „Unsere Web-Applikation schlägt Anwendern den für ihre Messung geeigneten Farbstoff vor“, erklärt Christina Wolf, Data Scientist bei NanoTemper. „Das macht Messungen zur Bindungsneigung effizienter und zuverlässiger.“

Revolutionäre AlphaFold-Daten bereits integriert

Die Web-Anwendung „Proto“ ist einfach zu bedienen und schafft zusätzliches Vertrauen in die Ergebnisse einer Messung. Um den am besten geeigneten Farbstoff vorherzusagen, nutzt die Software die 3D-Struktur des Proteins. Die Struktur stammt aus der RCSB-Protein-Datenbank oder aus der Strukturdatenbank AlphaFold des zur Google-Mutter Alphabet gehörenden Londoner Unternehmens DeepMind. Erst seit November 2021 hat DeepMind zusammen mit dem EMBL-EBI die Datenbank frei zugänglich gemacht.

Für die Vorhersage einer Proteinstruktur auf Basis der Aminosäuresequenz des Proteins nutzt AlphaFold das sogenannte Deep Learning – also mehrschichtige künstliche neuronale Netze, die von der Verschaltung der Neuronen im menschlichen Gehirn inspiriert sind. Insgesamt greift „Proto“ damit auf über 700.000 Proteinstrukturen zurück. „Wir

sind stolz, mit ‚Proto‘ eine der ersten kommerziellen Anwendungen von AlphaFold vorzustellen“, fügt der NanoTemper Geschäftsführer Philipp Baaske hinzu. Nach der Auswahl des Proteins wählen Proto-Nutzer zusätzlich die Bindungsstelle oder das Molekül aus, das ans Zielprotein binden soll. Mit diesen Eingaben vergleicht die Software mögliche Markierungsoptionen, leitet die am wenigsten störende Variante ab und gibt Empfehlungen für die anstehende Messung.

Diese neuartige Labeling-Vorhersage ist der erste wichtige Schritt, um Experimente im Bereich der Biotechnologie und Pharmaindustrie in Zukunft mit Hilfe künstlicher Intelligenz zu optimieren. „Die Forschenden sparen Zeit, weil aufwendige Untersuchungen zur Validierung der gewählten Markierung entfallen“, beschreibt PharmAI-Geschäftsführer Joachim Haupt die Vorteile. Das reduziere Kosten und vor allem auch den Verbrauch von Chemikalien. Die Lösung biete zudem Ansätze für neue Ideen. Zum Beispiel die Entwicklung und Integration moderner KI-gestützter Algorithmen für das Screening geeigneter Wirkstoffkandidaten für die Arzneimittelentwicklung. „Die Reduzierung der Anzahl der Kandidaten in Kombination mit der hohen Messgeschwindigkeit der Geräte von NanoTemper könnte dabei ein entscheidender Faktor werden“, fügt Christina Wolf hinzu.

Kostenfreier Zugang für wichtige Forschung

In den vergangenen Monaten wurde „Proto“ umfangreich getestet. Unter anderem anhand einer Proteinkinase, einem Enzym, das vor allem in der Krebsforschung eine große Rolle spielt. NanoTemper als auch PharmAI möchten, dass Forschende auf diesem und auch auf anderen Gebieten zügiger zu Ergebnissen kommen, indem sie schneller mit Messungen beginnen. Auch aus diesem Grund stellen sie ihr neues Werkzeug jetzt kostenlos zur Verfügung. Darüber hinaus wollen die beiden Unternehmen in Zukunft an weiteren innovativen Lösungen für die Arbeit im Labor arbeiten. Erste Ideen dazu gäbe es bereits.

„Wir möchten helfen, die Erforschung von Krankheiten und Therapeutika zu optimieren“, sagt Joachim Haupt. Es existieren außerdem zahlreiche seltene Krankheiten, deren Erforschung aktuell für große Pharmaunternehmen unrentabel ist. Durch die Möglichkeiten KI-basierter Software könnten künftig auch kleinere Labore in die Wirkstoffforschung einsteigen und mit ihrer Arbeit neue Therapien ermöglichen.

Probieren Sie Proto selbst aus: proto.nanotempertech.com.

Über PharmAI

PharmAI hat es sich zur Aufgabe gemacht, die Medikamentenentwicklung im Frühstadium durch höhere Erfolgsquoten bei gleichzeitiger Kostensenkung deutlich effizienter zu gestalten. Erreicht wird das durch eine bahnbrechende KI-gestützte Plattform für die Analyse von 3D-Proteinstrukturen. Durch diese Technologie wird die Zeitspanne für die Entdeckung neuer therapeutischer Moleküle drastisch verkürzt. PharmAI wurde 2019 als Spin-off der Technischen Universität Dresden gegründet.

Über NanoTemper Technologies

Die Mission von NanoTemper Technologies ist es, jedem die Möglichkeit zu geben, Forschung zu betreiben, die von Bedeutung ist, indem man immer wieder an Grenzen geht. Das Unternehmen wurde 2008 in München gegründet und entwickelt Werkzeuge, die anspruchsvolle Charakterisierungen für den Einsatz in der Wirkstoffforschung und der Grundlagenforschung adressieren. Heute hat NanoTemper über 170 Mitarbeiter und ist in 13 Ländern weltweit vertreten.

www.nanotempertech.com

Kostenlose Fotos zu dieser Pressemitteilung finden Sie unter www.pharm.ai/press/

Kontakte für Medienanfragen:

PharmAI GmbH

Jana Mundus
+49 351-41881626
press@pharm.ai

NanoTemper Technologies GmbH

John Valdez
+1 415 670-0424
john.valdez@nanotempertech.com