

Contenuto archiviato il 2024-06-18



Inferring DNA binding specificities through in silico folding of natively unstructured protein regions

Risultati in breve

Un nuovo modo per dedurre il legame tra DNA e proteine

Comprendere le interazioni molecolari tra proteine e DNA è fondamentale per lo studio di vari processi biologici. In linea con questo obiettivo un progetto finanziato dall'UE ha sviluppato un approccio "in silico" per prevedere la specificità del legame al DNA delle proteine.



SALUTE



© Thinkstock

La caratterizzazione completa delle singole proteine leganti acidi nucleici è di importanza primaria per delineare la complessa interazione delle reti di geni regolatori. Nella regolazione della trascrizione e della traslazione, così come nel ciclo cellulare, le prove che si stanno via via raccogliendo indicano un ruolo delle proteine, che non assumono una conformazione fissa allo stato

nativo, ma creano una struttura ordinata quando si legano. Le variabili di previsione disponibili però possono solo fornire informazioni sulla struttura di queste regioni delle proteine, e non sui loro tipi di ligandi né sulla modalità di interazione.

L'obiettivo primario del progetto PROTDNABINDSPEC, finanziato dall'UE, era

prevedere gli schemi di legame di queste regioni delle proteine non ripiegate allo stato nativo. Utilizzando la bioinformatica strutturale, gli scienziati hanno progettato, implementato e collaudato un metodo per prevedere la conformazione del legame al DNA delle regioni non ordinate delle proteine con risoluzione atomica.

Come primo passo è stata calcolata l'energia d'interazione tra diversi aminoacidi e nucleotidi, e inserita nel metodo Fragfold di predizione del ripiegamento delle proteine. La prevista specificità di legame al DNA di varie regioni di proteine non ripiegate allo stato nativo è stata poi utilizzata per identificare siti leganti il DNA nel genoma, ed è stata convalidata su base sperimentale.

Ci si aspetta che i risultati più importanti del progetto PROTDNABINDSPEC migliorino la nostra comprensione dei dettagli molecolari delle interazioni macromolecolari tra DNA e proteine. Sul lungo termine questo metodo aprirà la strada all'identificazione di nuovi bersagli e alla progettazione di molecole regolatrici.

Scopri altri articoli nello stesso settore di applicazione

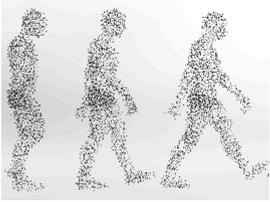


Qual è la probabilità di contrarre questa malattia?



Ecco come gli organoidi cerebrali potrebbero aprire la strada a nuovi innovativi trattamenti per la schizofrenia





Piano d'azione per la medicina intercettiva basata sulle cellule in Europa



Scoperte sul processo evolutivo aiutano a spiegare l'origine degli organi



Informazioni relative al progetto

PROTDNABINDSPEC

ID dell'accordo di sovvenzione: 237292

Progetto chiuso

Data di avvio

4 Settembre 2009

Data di completamento

3 Settembre 2011

Finanziato da

Specific programme "People" implementing the Seventh Framework Programme of the European Community for research, technological development and demonstration activities (2007 to 2013)

Costo totale

Nessun dato

Contributo UE

€ 163 702,68

Coordinato da

UNIVERSITY COLLEGE LONDON

Questo progetto è apparso in...

RIVISTA RESEARCH*EU



**Biodiversity: supporting
vital ecosystems**

Ultimo aggiornamento: 9 Novembre 2012

Permalink: <https://cordis.europa.eu/article/id/89598-a-novel-way-for-inferring-dnaprotein-binding/it>

European Union, 2025