

# Ansätze zur formalen Beschreibung von Aminosäureketten und Proteinen

Hermann von Issendorff  
D-21745 Hemmoor, Hauptstrasse 40  
Email: hviss@issendorff.de

## Zusammenfassung:

Jede Zelle eines Organismus ist eine kleine Fabrik, in der u.a. fortwährend bestimmte Proteine erzeugt und verbraucht werden. Die bei der Proteinerzeugung ablaufenden Vorgänge sind recht genau bekannt. Ribosome suchen zu diesem Zweck bestimmte Abschnitte auf den DNA-Strängen, lesen den darin enthaltenen Gencode und erzeugen daraus eine Kette von verschiedenen Aminosäuren.

Sobald die Aminosäurekette freigegeben wird, zieht sie sich zusammen und bildet dadurch ein Protein. Das Zusammenziehen geschieht mit grosser Geschwindigkeit und vor allem mit grosser Präzision und führt zu einer ganz bestimmten räumlichen Struktur. Insgesamt kann auf diese Weise eine enorme Zahl verschiedener Proteine gebildet werden (Grössenordnung  $10^5$ ).

Der eigentliche Zweck der verschiedenen Proteine besteht in den Funktionen, die sie innerhalb der Zelle ausüben. Die Ribosomen z.B. sind Proteine, die die Fähigkeit haben, auf einer DNA-Kette entlang zu wandern, je nach momentanem Bedarf aus ihrer Umgebung bestimmte Aminosäuren aufnehmen und der Kette hinzufügen. Andere Proteine, Proteasen genannt, betreiben z.B. so etwas wie Qualitätssicherung. Sie prüfen die Korrektheit der Proteine und zerschneiden sie in Einzelstücke, wenn sie fehlerhaft sind.

Die Struktur und die Funktionen eines Proteins hängen offenbar auf das Engste zusammen. Eine bestimmte Funktion kann nur ausgelöst werden, wenn ein anderes Molekül, etwa ein anderes Protein, mit allen seinen lokalen chemischen Bindungen genau zu dem Protein passt. Eine gängige Vorstellung ist die vom Schlüssel und dem Schloss, die allerdings nicht erklärt, was den Schlüssel dreht, d.h. was die Funktion triggert.

Wir wollen uns in diesem Vortrag vorwiegend mit der Frage befassen, wie sich räumliche Strukturen formal beschreiben lassen. "Beschreibung" bedeutet dabei "Darstellung als (eindimensionaler) String". Die dazu verwendete Sprache muss ausserdem die Eigenschaft haben, die auf oder in den Proteinen ablaufenden Vorgänge zu beschreiben. Diese stellen eine Art von Datenverarbeitung dar, bei der die Bits nicht wie im Computer in Form elektrischer Signale dargestellt werden, sondern als chemische Bindungen, die sich bilden und wieder auflösen können. Auch hierüber sollen einige - wenn auch recht spekulative - Bemerkungen gemacht werden.

Die zur Beschreibung der Strukturen und Vorgänge verwendete Sprache ist die Aktonalgebra, über die bereits mehrfach vorgetragen wurde. Mit geeigneter semantischer Interpretation lassen sich damit beliebige räumliche Strukturen beschreiben, z.B. auch Helixen und Faltungen, die für Proteine typisch sind. Die Aktonalgebra benötigt dafür insgesamt 6 Grundsorten von strukturbildenden Aktonen und dazu mindestens eine Grundsorte funktioneller Aktonen. Die Natur verwendet für den gleichen Zweck 20 verschiedene Aminosäuren. Es besteht damit eine gewisse Aussicht, dass sich die strukturellen und funktionellen Eigenschaften der verschiedenen Aminosäuren als Aktonterme beschreiben lassen. Zumindest könnte die Aktonalgebra einen Hinweis zur Entschlüsselung des Aminosäurencodes geben.