

В Центре научной коммуникации МФТИ сообщили, что ученые создали нейросетевой подход, который позволяет превращать мембранные белки в водорастворимые формы. Это решение способно ускорить изучение таких белков и подбор лекарств, которые на них воздействуют.

Мембранные белки важны для работы клеток и играют ключевую роль в развитии болезней. Однако вне клеточной мембраны они становятся нестабильными, из-за чего их сложно исследовать. Для решения этой проблемы ученые использовали два ИИ-инструмента: AlphaFold2 и SolubleMPNN. В тандеме они позволяют подбирать такие изменения в структуре белков, при которых те сохраняют функцию, но становятся растворимыми в воде.

Новый подход протестировали на бактериородопсине — белке, помогающем микробам улавливать свет. С помощью ИИ удалось создать 52 варианта водорастворимого аналога этой молекулы, из которых отобрали три наиболее перспективных. Далее их синтезировали и проверили на стабильность и функциональность с помощью спектроскопии и рентгеновской кристаллографии.

Результаты показали, что новые молекулы сохраняют свойства оригинала, но с ними проще работать.