

HUMBOLDT-UNIVERSITÄT ZU BERLIN

EXPOSE ZUR BACHELORARBEIT

**Entwicklung eines Peptid-Datenbank-Tools
für das PEC Verfahren**

Author
Jens Bork

Betreuer
Professor Dr. Ulf Leser

2. November 2017

1 Motivation

Im Jahr 2018 soll das Chemieunternehmen Belyntic gegründet werden, dabei im Fokus steht die Erforschung, Entwicklung und Produktion von Peptidmedikamenten zu verbessern. Wobei am teuersten Punkt der Verfahrenskette zur Herstellung von Peptiden angesetzt wird, der Reinigung des synthetisierten Produktes. Das im Vorfeld entwickelte PEC¹ Verfahren zur Reinigung von Peptiden ermöglicht es diese Peptide in beliebigen Mengen ökonomischer und ökologischer herzustellen. Das gängige Verfahren der chemischen Peptidgewinnung basiert auf zwei aufeinanderfolgenden Schritten; der Synthese und der anschließenden Reinigung. Im ersten Schritt entstehen dabei das Zielpeptid und verschiedene unerwünschte Nebenprodukte, welche entfernt werden müssen. Beim zweiten kritischen Schritt kommt nun das innovative PEC Verfahren zum Einsatz. Hierbei wird zu Beginn ein Linkermolekül auf das Zielpeptid gesetzt, um dann im anschließenden Reinigungsschritt das gewünschte Peptid zu fangen ("catch") und chemisch an ein modifiziertes Filtermaterial zu binden. Nachdem die Peptidlösung auf den Filter gegeben wurde und sich ausreichend Peptid gebunden hat, kann man diese mit einer Spaltlösung vom Filtermaterial trennen ("release"). Das Linkermolekül wird dabei rückstandslos vom Zielpeptid getrennt und man erhält ein sauberes Produkt.

Hierfür benötigt Belyntic eine Software welche alle Forschungsergebnisse, bereits existierende und noch kommende, aufnimmt und speichert. Für die Reinigung mit dem PEC Verfahren müssen bereits gewonnen Informationen schnell und einfach wieder aufgerufen werden können und alle wichtigen Eigenschaften auf einen Blick gut zu erkennen sein.

2 Ziele der Arbeit

Im Rahmen der Arbeit soll eine Softwarelösung entwickelt werden, welche modular aufgebaut ist und sich ohne Probleme erweitern lässt. Außerdem ist es wichtig, dass sich alle gespeicherten Informationen schnell und intuitiv finden lassen. Des Weiteren sollen Import und Export Optionen die Kommunikation mit anderen Wissensdatenbanken vereinfachen. Für die Arbeit mit dem PEC Verfahren sollen Grafiken bereits existierende Informationen aufarbeiten, um dem Benutzer das Finden optimaler Parameter zu vereinfachen.

¹Peptide Easy Clean

3 Lösungsweg

Am Anfang wird mit den Verantwortlichen von Belyntic eine Requirement Analyse durchgeführt, um ein passendes DBMS² zu finden. Danach werden die besprochene Daten in einem neu entworfenen Datenbankmodel abgebildet und implementiert. Um die Informationen einfach in die Software zu bekommen wird eine API³ für den Import entwickelt. Eine Prüfung der Daten findet vor der Speicherung statt, um eventuelle Fehler zu vermeiden.

Nachdem die Datenbasis steht wird ein Benutzeroberfläche erstellt, welches dem Benutzer ermöglicht die Daten komfortable zu durchsuchen, sowie Daten hinzuzufügen und zu verändern. Eine Export Funktion ermöglicht es dem Benutzer ausgewählte Datensätze formatiert zu exportieren.

Um die beim PEC Verfahren benötigten Parameter besser einschätzen zu können, wird für den Benutzer eine Analyse-Übersicht entworfen. Diese wird alle relevanten Daten nach Kriterien des Nutzer grafisch darstellen und mögliche Tendenzen hervorheben.

Unter Berücksichtigung der Modularität, wird alles mit Hilfe des MVC⁴ Designpatern entwickelt. Dabei wird die Programmiersprache Ruby mit dem Framework Ruby-on-Rails verwendet. Alle Features werden während der ganzen Entwicklungszeit automatisch getestet, um sicher zu stellen das sich keine Fehler einschleichen.

²Database Management System

³Application Programming Interface

⁴Model View Controller