

## InnCO2Search

Suche und Datenbankintegration CO<sub>2</sub> und Methan fixierender Enzyme mittels Catalophore<sup>TM</sup> und Deep Learning Technologien

<b>Programm / Ausschreibung</b>	IWI, IWI, Basisprogramm Ausschreibung 2022	<b>Status</b>	abgeschlossen
<b>Projektstart</b>	01.07.2022	<b>Projektende</b>	30.06.2023
<b>Zeitraum</b>	2022 - 2023	<b>Projektlaufzeit</b>	12 Monate
<b>Keywords</b>			

### Projektbeschreibung

Die signifikante Reduzierung von klimaschädlichen Gasen, allen voran Kohlendioxid (CO<sub>2</sub>) und Methan (CH<sub>4</sub>), kann als eines der wichtigsten globalen Ziele für diese und weitere Generationen angesehen werden. Vom jetzigen Standpunkt aus wäre es illusorisch zu glauben, dass nur eine Technologie in kurzer Zeit zu einer Konzentrationsumkehr führen wird. Es werden mehrere Technologien und Regelungen synergistisch wirken müssen, um diesem Problem Herr zu werden. Bereits heute wird versucht, durch Anreize, Förderungen, etc. risikoreiche, konservative, aber auch progressiv innovative Forschung und Anwendungen zu ermöglichen. Entgegen vieler Meinungen, dass diese Herausforderungen nur Geld kosten, bieten diese Initiativen auch die Chance mit smarten Technologien neue Märkte und neue Arbeitsplätze zu erschließen.

Viele Hoffnungen ruhen im Moment auf unterschiedlichen physikalischen, chemischen, biologischen und ökologischen Ansätzen. Die biologische Umwandlung von CO<sub>2</sub> ist ein praktikabler und nachhaltiger Ansatz für den Übergang von der bestehenden linearen Kohlenstoffwirtschaft zu einer Kreislaufwirtschaft im Rahmen einer erwünschten Bioraffinerie. Mikroorganismen als auch Enzyme als Biokatalysatoren sollen die Reduzierung von CO<sub>2</sub> und Methan im skalierbaren Gigatonnen Maßstab ermöglichen. Ein durchaus realistisches, aber auch risikoreiches Szenario. Müssen doch zur Erreichung dieses Ziels noch viele einzelne biotechnologische Zahnräder zu einem komplexen global wirkenden grünen Getriebe zusammengesetzt werden.

Zu diesem ambitionierten Ziel kann Innophore mit Hilfe einer Weiterentwicklung einer computergestützten Enzymsuch- und Entwicklungsplattform, basierend auf der bereits patentierten und angewandten Catalophore<sup>TM</sup> Technologie, einen Teil beisteuern. Aufbauend auf der innovativen strukturbasierten Suche von neuen Enzymen soll eine erweiterte Plattform etabliert werden, in der neue und noch unbekannte CO<sub>2</sub>- und Methan-bindende und -umsetzende Mikroorganismen bzw. bei denen die beiden Gase als Cosubstrate eine entscheidende Rolle spielen, identifiziert werden. Der Mehrwert der hier zur Anwendung kommenden Catalophore<sup>TM</sup> Suchtechnologie unter Miteinbeziehung der 3D physikochemischen Punktwolken besteht in einer innovativen und zugleich tiefergehenden Suche nach neuen Enzymen, die im Vergleich zu traditionellen Methoden und Technologien nur mit erheblichen finanziellen Ressourcen und großem Zeitaufwand durchgeführt werden kann.

Parallel dazu wird nach homologen und verbesserten Enzymen gesucht, welche sowohl in enzymatischen Elektrosynthesen als auch bereits bekannten Stoffwechselwegen eine Schlüsselrolle spielen, aber durch ihre geringe Aktivität bzw.

Umsetzungsrate den Prozess des CO<sub>2</sub>- oder Methanabbaus stark verlangsamen (z.B. RuBisCo im Calvin Zyklus; Assimilation von Kohlenstoff aus Kohlenstoffdioxid). Es werden daher unterschiedliche Ansätze bei der Suche verfolgt:

- i) Suche nach Proteinen, welche CO<sub>2</sub> und Methan direkt binden oder als Substrat verstoffwechseln.
- ii) Suche nach Proteinen, welche CO<sub>2</sub> und Methan als Cosubstrat nutzen.
- iii) Suche nach Proteinen, welche CO<sub>2</sub> und Methan in unterschiedlicher Form beinhalten (Hydrogencarbonat, Formiat,..)

In weiterer Folge nutzen wir die gesammelten und aufbereiteten Daten aus der Enzymsuche inklusive der vollständigen Sammlung/Übersicht der Modellstrukturen aller identifizierten Enzyme, um mit Hilfe von Machine Learning Modelle zu trainieren, welche dann im Stande sind, aus den Daten Klassifizierungen und Vorhersagen über beispielsweise Aktivität, Spezifität oder Stabilität zu treffen. Diese Vorhersagen sind dabei wesentlich schneller möglich als mit konventioneller Technologie. Benötigte Machine-Learning-Tools und Technologien werden in die Catalophore™ Plattform eingepflegt, um für spezifische Anwendungen bzw. Kundenaufträge angewandt zu werden.

Basierend auf der von Innophore bereits etablierten Catalophore™ Technologie und Erfahrung, welche im Vorfeld bei der Vorhersage kritischer SARS-CoV-2 Mutationen für internationales Aufsehen gesorgt hat, ergeben sich signifikante Vorteile in der positiven Umsetzung der Projektziele.

Zusammenfassend lässt sich sagen, dass dieses Projekt den Aufbau einer innovativen Plattformdatenbank für potenzielle neuartige CO<sub>2</sub>- und Methan-umwandelnde/-bindende Enzyme ermöglicht, die bisher in keiner Datenbank vorhanden sind, und damit vielen Projektideen und Anwendungen den nötigen Anstoß zur Umsetzung gibt. Neben der Bereitstellung dieser struktur-basierten Enzymdatenbank für globale Forschungs- und Anwendungsstrategien, welche zum Beispiel im Anschluss lizenzbasiert erworben werden kann, dient dieses Projekt Innophore als Vorstufe, um im Weiteren mit ausgewählten Partnern aus Forschung und Wirtschaft ein weitaus größeres Vorhaben (InnCO<sub>2</sub>Industries) für die skalierbare Entwicklung und Anwendung von Prozessen zur Reduzierung und Nutzung von klimaschädlichen Gasen umzusetzen.

## **Projektpartner**

- Innophore GmbH