

DFG-Forschungszentrum MATHEON
Mathematik für Schlüsseltechnologien

Berlin, 14. April 2011

Pressemitteilung

Hüpfende Protonen

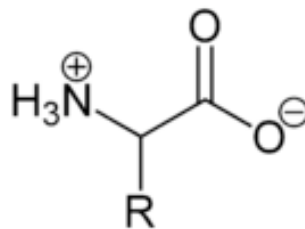
Dr. Burkhard Schmidt simuliert am MATHEON den Protonentransfer in Aminosäuren und kleinen Peptiden

Wie kann man das Verhalten von Protonen und Aminosäuren im Computer simulieren, wie kann man Experimente darstellen, bei denen sich das Verhalten bei mehr oder weniger Zufuhr von Wasser untersuchen lässt? Die Antwort auf diese Frage scheint im Zeitalter von Hochleistungsrechnern banal. In der Realität aber zeigt sich, dass diese Aufgabe ohne neue mathematische Algorithmen bis heute fast nicht lösbar ist. Zu schnell, zu „unberechenbar“ verhalten sich diese Protonen.

Im Projekt „Modellierung und Optimierung funktionaler Moleküle“ des DFG-Forschungszentrum MATHEON arbeitet Dr. Burkhard Schmidt unter Leitung von Prof. Christof Schütte an diesem Problem. Er untersucht in der Computersimulation die Rolle des Wassers als Lösungsmittel, wenn es schrittweise zu Aminosäuren oder Peptiden hinzugefügt wird. Vor allem will er den Protonentransfer zwischen zwei Endgruppen - er führt zur Bildung sog. Zwitterionen - und den Protonentransfer zwischen geeigneten Seitenketten - er führt zur Bildung von sog. Salzbrücken - erforschen.

Noch sind Schmidts Arbeiten Grundlagenforschung, die Ergebnisse seiner Forschung aber haben für viele Bereiche eine große Bedeutung. So spielt der Protonentransfer eine Rolle bei der Konversion von Sonnenenergie oder der Energieumwandlung in Brennstoffzellen, sie sind für den Energiefluss in Batterien interessant, aber auch bei der Entwicklung neuer Medikamente.

Ein Zwitterion ist ein Molekül mit zwei oder mehreren funktionalen Gruppen, von denen eine Gruppe positiv und eine andere negativ geladen ist. Das Molekül ist somit insgesamt elektrisch neutral. Eine Aminosäure ist ein zunächst elektrisch neutrales Molekül. Werden Aminosäuren jedoch in Wasser gelöst, beginnen die Wasser-Protonen zu hüpfen und führen zur Ausbildung eines negativ und eines positiv geladenen Endes der Säure. Dabei sind die Protonen ständig in Bewegung und gehen laufend neue Verbindungen ein. Durch das Hüpfen der Protonen entlang benachbarter Moleküle können Ladungen auch über Entfernungen auf der Nanometer-Skala in sogenannten Wasserbrücken oder "Wasserdrähten" transportiert werden. All das passiert in sehr schnellen Zeitskalen.

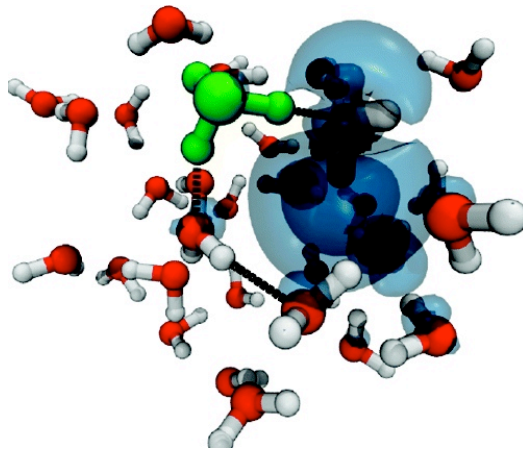


Zwitterion

Dr. Schmidt möchte nun mit seinem Projekt dazu beitragen, die Mechanismen des Protonentransfers auf mikroskopischer Basis zu verstehen. Dabei beschränkt er sich auf Aminosäuren und kleine Peptidketten. Sein Vorgehen beschreibt der Forscher so: „Obwohl die weitaus meisten biologischen Prozesse in wässriger Lösung auftreten, beginnen unsere Untersuchungen bei isolierten Aminosäuren und Peptiden, um so die intra- von den intermolekularen Prozessen trennen zu können. Anschließend werden in unseren Simulationen nach und nach einzelne Wassermoleküle hinzugefügt. Damit wollen wir den Einfluss des Lösungsmittels kontrolliert untersuchen.“ Ein ehrgeiziges Vorhaben, denn solche Untersuchungen sind nur in der Computersimulation und gar nicht oder nur schwer als Experiment durchzuführen.

Dabei will der Wissenschaftler zum Beispiel klären, wie viele Wassermoleküle erforderlich sind, um Aminosäuren oder Peptide von ihrer neutralen in ihre zwitterionische Form zu überführen. Untersuchen will er auch, was mit einer Salzbrücke passiert, wenn Wassermoleküle hinzugefügt werden. „Darüber hinaus ist es interessant, diese Prozesse in ihrer Zeitabhängigkeit zu simulieren, um so auch die Zeitskalen der untersuchten Prozesse studieren zu können. Wesentliche Fragen dabei sind, wie schnell Protonen von geeigneten Seitenketten abgelöst bzw. an diese angelagert werden können oder auf welcher Zeitskala Protonen zwischen Protein und Wasser übergeben werden und wie schnell der Transport von Protonen entlang von Wasserbrücken ist,“ erklärt Burkhard Schmidt.

Bei seinen Untersuchungen will Schmidt Verfahren anwenden, bei denen in jedem Zeitschritt der Simulationen die Energien bzw. Kräfte aus der Elektronenstruktur berechnet werden. Das unterscheidet seine Arbeit von „herkömmlichen“ Computersimulationen, bei denen empirische Modelle zur Berechnung von Energien und Kräften zwischen den Atomen angewandt werden. „Neben der fragwürdigen Genauigkeit und Übertragbarkeit solcher empirischer Modelle besteht die wesentliche Einschränkung darin, dass das Brechen und Bilden chemischer Bindungen so nicht beschrieben werden kann. Damit kann ich mich nicht zufrieden geben“, sagt er. Seine jetzige Forschung baut auf ein vorhergehendes Projekt auf, bei dem Dr. Schmidt die Reaktionen eines Protons und eines Elektrons in einem Wassercluster untersucht hat. (Cluster=Mikrotröpfchen)



Schnappschuss einer Initio Molecular Simulation

Dank seiner mathematisch/physikalischen Methoden gelingt es Burkhard Schmidt schon jetzt, die chemischen Vorgänge auf Großrechnern einige Pikosekunden (1 Pikosekunde = 0,000 000 000 001 Sekunden) zu rechnen. „Das ist schon sehr viel, mein Wunsch aber wäre Nanosekunden (0,000 000 001) zu erreichen“, sagt der Wissenschaftler.

Weitere Informationen: Dr. Burkhard Schmidt, Tel.: +49 30 838 75369, E-mail: burkhard.schmidt@fu-berlin.de