

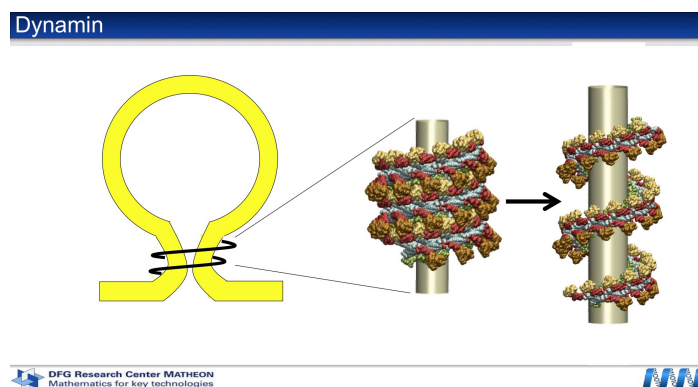
Berlin, 17.2.2012

Pressemitteilung

Der Weg in die Zelle

Mathematiker des MATHEON helfen bei der Erklärung molekularer Vorgänge

„Man kann sich einen aufgeblasenen Luftballon auf einer Luftpumpe vorstellen. Nur sehr viel kleiner. Wenn man nun mit einer Schlinge den Hals des Luftballons abschnürt, wird er von der Pumpe getrennt und kann sich frei bewegen“. So in etwa lässt sich einer der molekularen Vorgänge beschreiben, mit denen sich der FU-Mathematiker Dr. Frank Noe im MATHEON-Projekt A19, Modeling and optimization of functional molecules, beschäftigt. Konkret geht es dabei um die „Molekulare Struktur und den Mechanismus von Dynamin“.



Dynamin ist ein Eiweißmolekül und „die Schlinge“, die den Ballon von der Halterung trennt. Diese Trennung ist notwendig, damit das Vesikel, so heißt der Ballon wissenschaftlich, seine Aufgabe als Transportmittel von Boten- oder Nährstoffen in die Kör-

perzellen wahrnehmen kann. Zunächst lagern sich die zu transportierenden Stoffe in einem Vesikel ab, das sich aus der Zellhülle einstülpt, danach dockt das Dynamin-Molekül an den Hals des Vesikels an und bildet eine Spirale darum. Schließlich trennt es diesen Hals durch. Das Vesikel ist nun frei und kann die Nährstoffe in die Zellen transportieren.

Dieser Vorgang ist schon länger bekannt, aber die molekularen Details der Arbeitsweise des Dynamins waren bislang ungeklärt. Einer Forschergruppe am Max-Delbrück-Zentrum für Molekulare Medizin (MDC) in Berlin ist es nun gelungen, „Schnappschüsse“ der molekularen Feinstruktur zu bekommen. Mit Hilfe der mathematischen Forschungen von Frank Noe und seinen Kollegen im MATHEON gelang es, diesen statischen Strukturen Leben einzuhauchen.

„Ohne mathematische Methoden wäre es nicht möglich gewesen, die Abläufe bei der Durchtrennung des Vesikelhalses zu simulieren“, erklärt der Mathematiker. Denn die Simulation des molekularen Prozesses ist äußerst aufwendig: „Eine Simulation hat 250.000 Teilchen, und ein Rechenschritt dauert selbst auf einem Großrechner 1 Sekunde. Allerdings müssten wir Millionen von Rechenschritten durchführen um den Prozess direkt zu simulieren. Das würde Jahrzehnte dauern, obwohl die Abschnürung in der Zelle nur Millisekunden braucht.“ Mithilfe der mathematischen Methoden, die im MATHEON entwickelt wurden, konnte der Abschnürvorgang in viele kleine Simulationen aufgeteilt und somit beherrschbar gemacht werden.

Im Fall von Dynamin hat dies zur Folge, dass man die genaue Vorgehensweise dieses Moleküls nun erstmals in seinen einzelnen Abläufen darstellen konnte. Dabei hat sich gezeigt, dass das Molekül einer bestimmten Dynamik folgt. „Wir konnten drei wesentliche Zustände des Moleküls feststellen“, sagt der Mathematiker und beschreibt den Ablauf so: „Dynamin-Moleküle legen sich zunächst einzeln an den Vesikel-Hals und verbinden sich dann zu mindestens eineinhalb bis zwei engen Windungen. Dann geht dieses Gebilde wie eine Sprungfeder auf und dreht sich dabei in sich. Dadurch wird das zähflüssige Material des Vesikelhalses quasi abgerissen.“

Für die Medizin ist das Verständnis dieses Vorgangs vor allem wichtig, weil er einer der Angriffspunkte für Gifte und Krankheiten ist. „Beispielsweise greifen viele Nervengifte an dieser Stelle an und blockieren damit die Nervenfunktion“, weiß Frank Noe. Aber auch neurodegenerative Krankheiten wie Parkinson beeinflussen die Vesikelaufnahme in Nervenzellen. „Wenn wir die Arbeitsweise von Dynamin besser verstehen, können wir auch neue Ansatzpunkte für die Frühdiagnostik oder die medizinische Behandlung finden“, so Dr. Noe.

Die Zusammenarbeit von Mediziner, Strukturbiologen und Mathematikern wird auf diesem Gebiet natürlich fortgesetzt. „Mit unseren mathematischen Forschungen im MATHEON-Projekt können wir sicherlich auch weiterhin wertvolle Erkenntnisse befördern und beisteuern“, so Frank Noe.

Diese Arbeit wurde in der Fachzeitschrift „Nature“ in der Ausgabe 477 auf Seite 556 veröffentlicht. Weitere Informationen über diese Arbeiten erhalten sie unter <http://www.nature.com/nature/journal/v477/n7366/full/nature10369.html> sowie www.biocomputing-berlin.de/biocomputing/en/projects/matheon_project_a19_modelling_and_optimization_of_functional_molecules

Auch Frank Noe gibt Ihnen gerne weitere Auskünfte unter Telefon: 030 838 75354 oder Email: noe@math.fu-berlin.de.