
9

Moleküldynamik und Modellierung von Proteinen

Prof. Dr. Maria Andrea Mroginski,
Technische Universität Berlin, Institut für Chemie,
Fachgebiet Physikalische Chemie / Biophysikalische Chemie

Interview/Projektvorstellung im Rahmen der Ausstellung
»WeltWissen. 300 Jahre Wissenschaften in Berlin«
Martin-Gropius-Bau, Berlin
24. September 2010–9. Januar 2011

Interviews/Textredaktion: Anne Seubert/WeltWissen
Fotos: Eberle & Eisfeld | Berlin
Layout: SPACE4, Stuttgart





Worum handelt es sich bei dem ausgestellten Objekt?

Dies sind dreidimensionale Modelle eines Enzyms und seines katalytischen Zentrums. Es ist ein sogenanntes Hydrogenase-Enzym: ein Makromolekül (Protein), das Wasserstoff bildet und spaltet. Dieser komplexe Prozess vollzieht sich nur in einem kleinen Teil des Proteins, dem katalytischen Zentrum. Für eine Wasserstoffspaltung muss der Wasserstoff ins Protein gelangen und dort zum aktiven Zentrum finden. Anschließend müssen die entstandenen Elektronen und Protonen das Protein verlassen können. Die Struktur des Proteins muss also Transportwege für kleinere Moleküle, Protonen und Elektronen beinhalten.

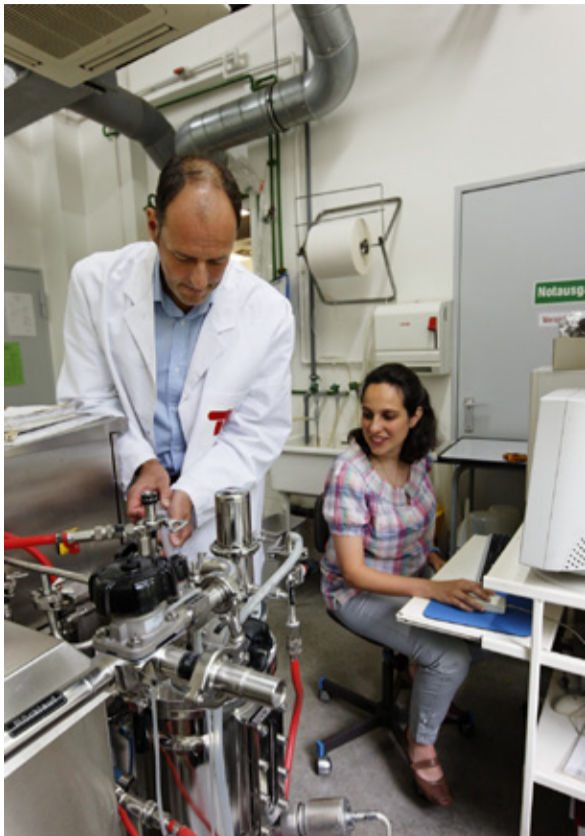
Woran forschen Sie in diesem Zusammenhang?

Meine Hauptbeschäftigung ist die Modellierung von Makromolekülen – also Molekülen mit über 1.000 Atomen. Wir möchten die Merkmale von Molekülen verstehen und insbesondere elektronische Eigenschaften von Molekülen reproduzieren. Für diese Untersuchungen nutzen wir das Verfahren der Moleküldynamik-Simulationen zur Berechnung der Wechselwirkungen zwischen Atomen und Molekülen. Grundlage dieser Methoden sind die einfachen Bewegungs- und Kraftgesetze der Physik. Diese werden auf komplexe Systeme wie Proteine angewendet. Die rechnerisch aufwändigere quantenmechanische Methode wird ausschließlich zur Untersuchung des katalytischen Zentrums genutzt, das die Funktion des Proteins bestimmt.

Prof. Andrea Mroginski bei der Betrachtung des katalytischen Zentrums eines Molekülmodells

Prof. Dr. Maria Andrea Mroginski

Maria Andrea Mroginski ist Physikerin und seit 2009 Juniorprofessorin für das Fachgebiet »Modellierung biomolekularer Systeme« an der TU Berlin. Sie forscht zu den strukturellen und funktionellen Eigenschaften von komplexen enzymatischen biologischen Systemen durch Berechnungsverfahren und zur Berechnung der Raman- und Resonanz-Raman-Spektren.



Prof. Andrea Mroginski (TU) und Dr. Oliver Lenz (HU) bei der Entnahme einer biologischen Probe aus dem Fermenter in einem Anzucht-labor der Technischen Universität

Inwieweit handelt es sich um ein interdisziplinäres Projekt?

In der Natur gibt es Millionen von Proteinen mit unterschiedlichsten Funktionen. Proteine sind sehr komplexe Makromoleküle mit vielen interagierenden Atomen. Hier am Institut für Physikalische und Biophysikalische Chemie konzentrieren wir uns auf biomolekulare Systeme wie Proteine. Wir arbeiten eng mit Biologen und Mikrobiologen zusammen, um das Protein anzuziehen und aus den Zellen zu extrahieren. Für den molekularbiologischen Teil arbeiten wir beispielsweise intensiv mit Professor Friedrich und Dr. Lenz von der Humboldt-Universität zusammen. Proteine lassen sich mit geeigneten Methoden isolieren, um sie anschließend mit unterschiedlichen spektroskopischen Methoden zu untersuchen. In unserem Institut wird dies beispielweise von Prof. Hildebrandt und Dr. Zebger durchgeführt. So lässt sich ein dreidimensionales Bild des Proteins erstellen und am Computer analysieren. Dabei erhält man Informationen über Form, Struktur, Position und Verbindungen zwischen den Atomen, sowie über die Funktionen des Moleküls. Aus den so gewonnenen Daten versuchen wir ein möglichst vollständiges Bild der molekularen Struktur zu gewinnen.

Was fasziniert Sie an Ihrer Arbeit?

Unsere Aufgabe ist es, Prozesse auf atomarem Niveau zu verstehen. In diesen Details merkt man jeden Tag, wie perfekt die Natur chemische Prozesse einsetzt und kontrolliert. Das macht mich sehr glücklich. Jedes Molekül ist eine perfekte kleine Maschine. Wir versuchen zu verstehen, wie diese kleinen Systeme beispielsweise Wasserstoff aufnehmen und in einem komplexen Prozess daraus etwas anderes produzieren. Wir Menschen können lernen, diese kleinen Maschinen nachzuahmen, um nützliche Anwendungen zu schaffen. Das fasziniert mich.

Wo sehen Sie für Ihre Arbeit eine gesellschaftliche Relevanz?

Wir untersuchen unter anderem Mikroprozesse in Proteinen, die lebenswichtige Funktionen im menschlichen Körper haben. Empirisch ist vielleicht bereits bekannt, dass ein Prozess abläuft, aber unsere Grundlagenforschung hilft zu verstehen, warum und wie genau er vonstattengeht. Daraus ergibt sich beispielsweise für die Medizin die Möglichkeit der Steuerung, Unterdrückung und Optimierung zellzerstörender oder heilender Prozesse. Bestimmte Proteine, wie Hydrogenasen, haben Eigenschaften, die für die Energieerzeugung und in der Biotechnologie genutzt werden können. Sie dienen zum Beispiel zur Gewinnung von Biowasserstoff und Strom. Das wichtige bei solch einer Anwendung ist, dass die Hydrogenasen unter Beteiligung von Sauerstoff arbeiten können und nicht inaktiviert werden, wie es bei den meisten Enzymen dieses Typs die Regel ist. Dies ist der Fall bei den Hydrogenasen, die uns von der Arbeitsgruppe Friedrich/Lenz zur Verfügung gestellt werden. Wir forschen auch an der Aufklärung des Mechanismus, der dieser außergewöhnlichen Sauerstofftoleranz zugrunde liegt.

Technische Universität Berlin (TU)

Die Technische Universität Berlin ist eine von vier Universitäten in der deutschen Hauptstadt. Als starke Forschungsuniversität fördert sie die Kooperation von Wissenschaft und Wirtschaft. Sie ist Teil des Exzellenzclusters »Unifying Concepts in Catalysis« (UniCat), eines 2007 gegründeten interdisziplinären Forschungsverbundes des Bundes und der Länder.