

Pressemitteilung**Ruhr-Universität Bochum****Dr. Josef König**

06.08.2008

<http://idw-online.de/de/news273198>Forschungsprojekte, Personalia
Biologie, Chemie
überregional**RUB-Chemie: Auszeichnung und kostbare Rechenzeit für Prof. Dominik Marx' "virtuelles Labor"**

Nr. 235 "John von Neumann Exzellenz-Projekt 2008" in der RUB-Chemie Präbiotische Chemie im "Virtuellen Labor" Wie ist wohl das erste Protein entstanden - lange bevor es Lebewesen gab, die Proteine aus einzelnen Bausteinen aktiv zusammenknüpfen? Um diese Frage ranken sich viele Spekulationen; Prof. Dr. Dominik Marx und Mitarbeiter gehen ihr mittels Computersimulation im "virtuellen Labor" auf den Grund. Diese Arbeiten seines Lehrstuhls für Theoretische Chemie der Ruhr-Universität wurden jetzt vom John von Neumann-Institut für Computing am Forschungszentrum Jülich unter 140 Kandidaten als "John von Neumann Exzellenz-Projekt 2008" ausgewählt. Das Projekt wurde aufgrund seiner ausgezeichneten Vorarbeiten, der hohen Bedeutung der zu erwartenden Erkenntnisse und der Qualität der eingesetzten Methoden ausgewählt. Mit dem Prädikat ist eine besonders hohe Zuteilung von Rechenzeit verbunden.

Proteine bilden sich spontan

Prof. Marx wird seine Berechnungen auf dem schnellsten deutschen Supercomputer JUGENE des Forschungszentrums Jülich durchführen können. Er "füttert" den Supercomputer mit den Eckdaten einer so genannten "Eisen-Schwefel-Welt", von der man annimmt, dass sie so vor Jahrmillionen einmal existiert haben könnte. Die Hypothese ist, dass an den Oberflächen von Eisen-Schwefel-Mineralien bei hoher Temperatur und hohem Druck des Wassers als Medium Peptide aus ihren einzelnen Bausteinen spontan entstanden sein könnten. Allerdings ist es schwierig, solche Reaktionen bei mehreren hundert Grad und Bar kontrolliert experimentell durchzuführen und gleichzeitig die Auswirkungen dieser exotischen Reaktionsbedingungen zu messen. "Das funktioniert nur im virtuellen Labor", so Marx. "Mit modernsten Simulationsmethoden in Kombination mit den leistungsfähigsten Rechnern ist es möglich, diese Extrembedingungen nicht nur herzustellen, sondern auch Eins zu Eins mit normalen Reaktionsbedingungen zu vergleichen."

Rekordverdächtiger Rechenaufwand

Anhand bisheriger Berechnungen konnten die Theoretiker schon nachweisen, dass diese für die Biochemie doch unüblichen Reaktionsbedingungen die Bildung von Peptidbindungen beschleunigen. Der Aufwand einer solchen "ab initio"-Studie, die (fast) keinen experimentellen Input benötigt, ist allerdings exorbitant, denn es müssen viele einzelne Reaktionsschritte sowie deren Rückreaktionen unter verschiedenen Reaktionsbedingungen simuliert werden. Der Rechenaufwand ist rekordverdächtig und wird überhaupt erst durch ausgiebige Nutzung der Blue Gene Capability Rechner des John von Neumann-Institut für Computing in Jülich im Verbund mit dem hocheffizienten Programm "CPMD" möglich.

Weitere Informationen

Prof. Dr. Dominik Marx, Lehrstuhl für Theoretische Chemieder Ruhr-Universität Bochum, 44780 Bochum, E-Mail: dominik.marx@theochem.rub.de, Internet: <http://www.theochem.rub.de>

URL zur Pressemitteilung: <http://www.theochem.rub.de>

