

Press release

Ruhr-Universität Bochum

Meike Drießen

12/02/2020

<http://idw-online.de/en/news759095>

Personnel announcements, Research results
Biology, Chemistry
transregional, national



Golden Spike Award: Wie biologische Nanotransporter Medikamente aus Zellen herausschleusen

Wie Moleküle in Zellen hinein- und herausbefördert werden, kann zum Beispiel über die Wirksamkeit von Medikamenten entscheiden. Durch Computersimulationen konnte das Team von Prof. Dr. Lars Schäfer detaillierte Einblicke in die Aktivitäten der sogenannten ABC-Transporter gewinnen: biologischen Nanomaschinen, die für den Transport einer breiten Palette von Molekülen durch Zellmembranen zuständig sind. Für die jüngsten Ergebnisse wurde der Leiter der Arbeitsgruppe Molekulare Simulation der Ruhr-Universität Bochum (RUB) am 20. Oktober 2020 mit dem Golden Spike 2020 Award des Höchstleistungsrechenzentrums Stuttgart ausgezeichnet.

Resistenzen von Tumorzellen und Bakterien

ABC-Transporter koppeln die Bindung und chemische Spaltung von ATP-Molekülen, der chemischen Energieeinheit der Zelle, mit dem Transport von Molekülen durch biologische Membranen. Eine Besonderheit der ABC-Exporter ist, dass sie viele verschiedene Moleküle aus der Zelle heraus transportieren: von Lipiden über Peptide bis zu chemotherapeutischen Wirkstoffen. „Daher spielen die ABC-Exporter eine wichtige Rolle unter anderem für Multi-Drug-Resistenzen von Krebszellen und Antibiotika-Resistenz von Bakterien“, erklärt Schäfer.

In der prämierten Arbeit ist es seinem Team gelungen, zum ersten Mal den Transport eines Substratmoleküls – des Chemotherapeutikums Daunorubicin – durch einen ABC-Exporter hindurch in atomarem Detail in Molekulardynamik-Simulationen zu beobachten und damit aufzuklären.

Förderung

Die prämierten Arbeiten wurden gefördert durch die Deutsche Forschungsgemeinschaft mit dem Grant SCHA1574/6-1 sowie im Rahmen des Exzellenzclusters Ruhr Explores Solvation (Resolv, www.solvation.de).

Der Preis

Jedes Jahr findet – normalerweise in Stuttgart, diesmal online – ein Treffen der Nutzerinnen und Nutzer des Höchstleistungsrechenzentrums Stuttgart statt, bei dem sie einander ihre Arbeiten vorstellen. Die Leitung des Höchstleistungsrechenzentrums wählt aus diesen Arbeiten der vorangegangenen zwölf Monate drei herausragende für die Auszeichnung mit dem Golden Spike Award aus. Kriterien für die Auswahl sind unter anderem wissenschaftliche Relevanz, optimale Nutzung der Ressourcen des Rechenzentrums sowie die Präsentation.

Zur Person

Lars Schäfer studierte Chemie an der Technischen Universität Braunschweig und machte dort 2003 seinen Diplom-Abschluss. Für seine Doktorarbeit wechselte er an das Max-Planck-Institut für biophysikalische Chemie in Göttingen in die Abteilung für Theoretische Biophysik, wo er 2007 promovierte. Im Anschluss wechselte er an die Universität Groningen in den Niederlanden, wo er ein Veni-Postdoktoranden-Fellowship des Dutch Research Council einwarb. Nachdem er ab 2012 eine durch das Emmy-Noether-Programm der Deutschen Forschungsgemeinschaft geförderte Arbeitsgruppe am Institut für Physikalische und Theoretische Chemie der Goethe-Universität Frankfurt leitete, wechselte er Anfang 2014 auf die Professur für Molekulare Simulation an den Lehrstuhl für Theoretische Chemie der RUB.

Originalveröffentlichung

Hendrik Göddeke und Lars V. Schäfer: Capturing substrate translocation in an ABC exporter at the atomic level, in: Journal of the American Chemical Society, 2020, DOI: 10.1021/jacs.0c05502, <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/jacs.0c05502>

Pressekontakt

Prof. Dr. Lars Schäfer
Arbeitsgruppe Molekulare Simulation
Fakultät für Chemie und Biochemie
Ruhr-Universität Bochum
Tel.: +49 234 32 21582
E-Mail: lars.schaefer@rub.de

contact for scientific information:

Prof. Dr. Lars Schäfer
Arbeitsgruppe Molekulare Simulation
Fakultät für Chemie und Biochemie
Ruhr-Universität Bochum
Tel.: +49 234 32 21582
E-Mail: lars.schaefer@rub.de

Original publication:

Hendrik Göddeke und Lars V. Schäfer: Capturing substrate translocation in an ABC exporter at the atomic level, in: Journal of the American Chemical Society, 2020, DOI: 10.1021/jacs.0c05502, <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/jacs.0c05502>