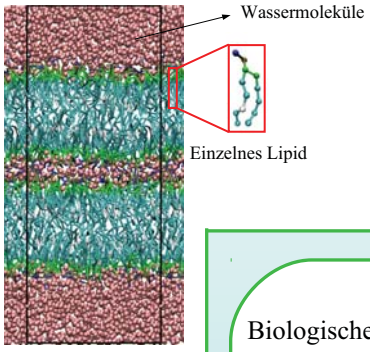
Computergestützte weiche Materie und Biophysik

Arbeitsgruppe Prof. Marcus Müller, Institut für theoretische Physik

Mittels Computersimulationen untersuchen wir die statistischen Eigenschaften weicher Materie mit besonderem Interesse an Nano- und Micro-Fluidik sowie biologisch motivierte Fragestellungen.

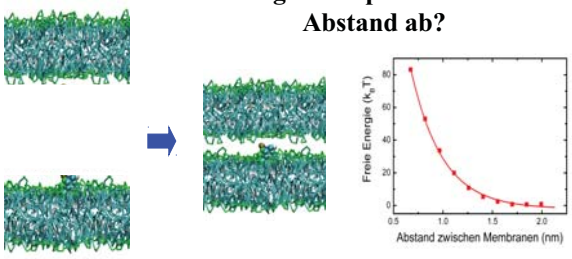
Zwei benachbarte Lipid-Doppelschichten sind durch eine dünne Wasserschicht getrennt.



Yuliya Smirnova

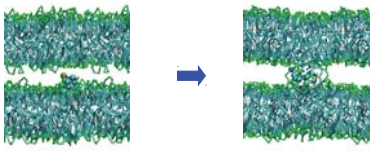
Thema 1:

Wie hängt die repulsive Kraft vom Abstand ab?



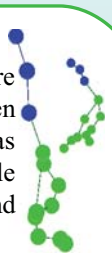
Thema 2:

Trennen sich Lipid-Mischungen an gekrümmten Oberflächen?



Kollektive Phänomene in Lipidmembranen

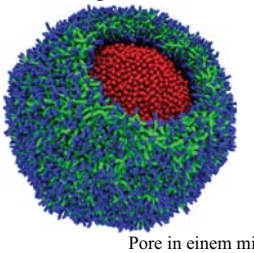
Biologische Membranen bestehen aus Lipiden, die nur durch ihre **Amphiphilie** (hydrophiler Kopf / hydrophober Schwanz) zusammengehalten werden. Sämtliche Vorgänge an Lipidmembranen erfordern daher das kollektive Zusammenspiel einer großen Zahl von Lipidmolekülen. Beispiele für solche Vorgänge sind **Fusion**, sowie die Bildung von **Poren** und Lipidbrücken (**Stalks**).



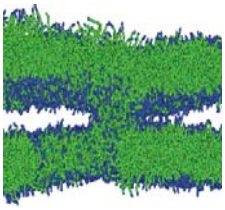
Unser vergröbertes Modell der amphiphilen Lipide. Die hydrophilen Kopfgruppen sind in blau, die hydrophoben Schwänze in grün dargestellt.

Vergröberte Molekulardynamik Simulationen

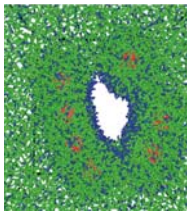
Wir fassen mehrere Atome zu einem einzelnen vergröberten Partikel zusammen. Durch Verwendung von gemittelten, effektiven Wechselwirkungen kann das kollektive Verhalten der Lipide korrekt wiedergegeben werden.



Pore in einem mit Wasser gefüllten Vesikel



Darstellung einer **Pore** und eines **Stalk**s



Eine durch sieben Peptide stabilisierte Pore

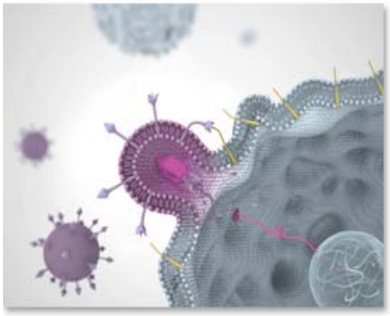
Funktionen von Lipidmembranen

- Räumliche Trennung verschiedener metabolischer Prozesse
- Aufbau (elektro-) chemischer Gradienten
- Medium für Membranproteine

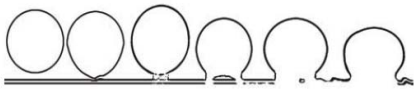
Einfluss von Peptiden

Umformungen der Membranen werden durch Peptide kontrolliert. Diese beeinflussen:

- Packung und Ordnung der Lipide
- spontane Krümmung der Membran
- Kosten von Grenzflächen



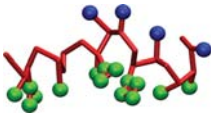
Fusion



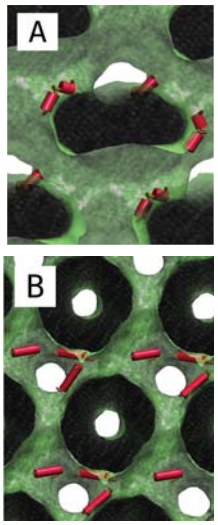
Spielt in vielen physiologischen und pathologischen Prozessen eine Rolle und hat außerdem technische Anwendungsmöglichkeiten. Beispiele sind:

- Synaptische Übertragung
- Virale Infektion
- Einschleusen von Fremdmolekülen (z.B. DNA, Medikamente) in lebende Zellen

Marc Fuhrmans

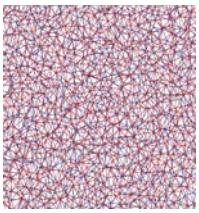


Modell des Influenza HA Fusionspeptids. Hydrophobe Seitenketten sind in blau, hydrophile in grün dargestellt.



Komplex gekrümmte Oberflächen von durch Fusionspeptide induzierten kubischen Phasen.

Giovanni Marelli



Position der Lipide in der oberen (rot) und unteren (blau) Monolage und die Dreiecke die die Lipide verbinden.

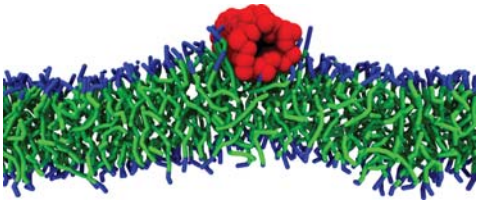
Thema 3:

Permeabilität und elektrische Kapazität von Lipidmembranen?

Obere und untere Monolage einer Membran um ein Peptid herum (rot). Die Ecken der Dreiecke kennzeichnen die Position der Lipide.
Was ist die Wahrscheinlichkeit, dass der Überlapp zweier Dreiecke der oberen und unteren Monolage groß genug für ein Wassermolekül ist?
Wie ändert die Anwesenheit eines Proteins die mittlere Fläche pro Lipid?

Thema 4:

Wie beeinflussen Peptide die Krümmung von Lipidmembranen?



Durch ein stark vereinfachtes zylinderförmiges Peptid (rot) in einer Lipidmembran erzeugte Krümmung.