

Pressedienst Wissenschaft

München, den 29. Februar 2008

Veröffentlichung in „PNAS“:

TUM-Physiker entschlüsseln zentrale Wechselwirkung der Biologie

Mit dem Rasterkraftmikroskop auf den Spuren der hydrophoben Anziehung – Verbesserte Vorhersage von Protein-Strukturen und Eigenschaften

Eine der wichtigsten Kräfte in der Biologie konnte bisher nicht zufriedenstellend erklärt werden: die hydrophobe (wasserabstoßende) Anziehung. Der Durchbruch gelang jetzt einem Forscherteam um Dr. Dominik Horinek aus der Arbeitsgruppe von Prof. Roland Netz, Ordinarius für Theoretische Physik an der Technischen Universität München (TUM), in Zusammenarbeit mit Prof. Thorsten Hugel vom Lehrstuhl für Biophysik der TUM. Die Wissenschaftler maßen die hydrophobe Anziehung zwischen einer einzelnen Peptid-Kette und einer Diamant-Oberfläche mit einem Rasterkraftmikroskop (AFM) und verglichen sie mit molekular-dynamischen Simulationsrechnungen. Die Ergebnisse erlauben weitreichende Schlüsse über den Mechanismus dieser fundamentalen Wechselwirkung. Sie kann nun erstmals auch quantitativ erklärt werden. Die Forschungsarbeit wurde in der aktuellen Ausgabe der amerikanischen Fachzeitschrift „Proceedings of the National Academy of Sciences“ (PNAS) veröffentlicht.

In wässriger Umgebung ziehen sich nicht-polare Moleküle aufgrund der hydrophoben Wechselwirkung an. Diese Kraft ist von zentraler Bedeutung für die Biologie, etwa bei der Proteinfaltung und dem Zusammenhalt von großen Proteinmolekülen, aber auch für viele Phänomene des täglichen Lebens, zum Beispiel bei der Bindung von Fettmolekülen durch Seife oder der Stabilität von Mayonnaise und anderen Emulsionen.

Dass der Mechanismus der hydrophoben Wechselwirkung bislang noch nicht zufriedenstellend erklärt werden konnte, liegt an den bislang untersuchten Modellsystemen. Viele Wissenschaftler betrachteten etwa zwei einander auf wenige Nanometer angenäherte schwach gekrümmte hydrophobe Oberflächen. Die Messungen mit diesem sogenannten „Surface-Force Apparatus“ werden aber durch die Bildung von Luftblasen zwischen den Oberflächen gestört, so dass die eigentliche hydrophobe Kraft nicht bestimmt werden kann. Auch für Simulations-Studien ist diese Geometrie ungeeignet, da das Wasser zwischen den Oberflächen relativ träge ist und der Gleichgewichtszustand nur sehr langsam erreicht wird.

Technische Universität München Corporate Communications Center 80290 München www.tum.de

Dr. Ulrich Marsch
Verena Saule M.A.

Sprecher des Präsidenten
PR-Referentin

+49.89.289.22778
+49.89.289.22562

marsch@zv.tum.de
saule@zv.tum.de

Um das Problem zu lösen, konzipierten die Münchner Wissenschaftler aus den Arbeitsgruppen von Thorsten Hugel und Roland Netz ein neuartiges Modellsystem. Die Umsetzung erfolgte mit Hilfe des Oberflächen-Experten Dr. José Garrido vom Walter-Schottky-Institut der TUM und des Biochemikers Prof. Thomas Scheibel, Universität Bayreuth. Unterstützung bekamen die Forscher auch vom AFM-Spezialisten Prof. Hermann Gaub von der Ludwig-Maximilians-Universität München.

Die Wissenschaftler befestigten ein einzelnes Peptid-Molekül mittels einer kovalenten Bindung an der Spitze eines Rasterkraftmikroskops (AFM). Das verwendete Peptid ist ein Hauptbestandteil der Spinnenseide. Die auf diese Weise präparierte Spitze wurde so weit an eine extrem glatte hydrophobe Diamant-Oberfläche angenähert, bis die Peptid-Kette auf der Oberfläche adsorbierte. Die Spitze wurde nach oben gezogen und gleichzeitig die dabei aufgewendete Kraft gemessen.

Mit den Ergebnissen können die Forscher zeigen, dass die Peptid-Kette durch den Zug zunächst auf der Oberfläche entlang gleitet, bis sie sich komplett von ihr löst, also desorbiert. Aus über 200 dieser Messungen kann eine mittlere Desorptionskraft von 58 Pico-Newton ermittelt werden. Dieser Wert stimmt gut mit der Kraft von 54 Pico-Newton überein, die sich für das Modellsystem aus molekular-dynamischen Simulationen ergibt. Prof. Netz betont: „Dies ist nach unserem Wissen die erste quantitative Untersuchung der hydrophoben Wechselwirkung, die eine Übereinstimmung zwischen Experiment und Theorie zeigt.“

Dank dieser Bestätigung konnte anhand der theoretischen Simulation der grundlegende Mechanismus der Wechselwirkung entschlüsselt werden. Überraschend wurde deutlich, dass die Dispersions- oder auch van-der-Waals-Kräfte zwischen der Oberfläche und der Peptid-Kette genauso stark sind wie die Solvationskräfte aufgrund der gestörten Molekül-Struktur des Wassers in der Nähe von Peptid und Oberfläche. Netz ist sich sicher: „Damit ist eine unter Experten lange geführte Diskussion beendet. Keine der beiden Kräfte dominiert. In einem synergetischen Zusammenspiel bestimmen beide Teilbeiträge gleichermaßen die resultierende hydrophobe Anziehung.“ Mit diesem neuartigen Messprinzip soll in Zukunft die Wechselwirkung verschiedenster Peptid-Moleküle mit unterschiedlichen Oberflächen untersucht und damit die Vorhersage von Protein-Strukturen und Eigenschaften verbessert werden.

Die aktuelle Arbeit fand im Rahmen des Exzellenzclusters „Nanosystems Initiative Munich (NIM)“ statt, das sich zum Ziel gesetzt hat, funktionale Nanostrukturen für Anwendungen in der Medizin und in der Informationsverarbeitung zu entwickeln und zu erforschen.

Technische Universität München Corporate Communications Center 80290 München www.tum.de

Dr. Ulrich Marsch
Verena Saule M.A.

Sprecher des Präsidenten
PR-Referentin

+49.89.289.22778
+49.89.289.22562

marsch@zv.tum.de
saule@zv.tum.de

Veröffentlichung:

„Peptide adsorption on a hydrophobic surface results from an interplay of solvation, surface, and intrapeptide forces”, D. Horinek, A. Serr, M. Geisler, T. Pirzer, U. Slotta, S. Q. Lud, J. A. Garrido, T. Scheibel, T. Hugel, and R. R. Netz, PNAS, 105, no. 8 (2008)

Kontakt:

Prof. Dr. Roland Netz
Physik Department (T37)
Technische Universität München
Tel.: +49 (0)89 289 12394
E-Mail: netz@ph.tum.de
www.physik.tu-muenchen.de/lehrstuehle/T37

Dr. Peter Sonntag
Nanosystems Initiative Munich
Presse- und Öffentlichkeitsarbeit
Tel.: +49 (0)89 2180 5091
E-Mail: peter.sonntag@lmu.de
www.nano-initiative-munich.de

Die **Technische Universität München (TUM)** ist mit rund 420 Professorinnen und Professoren, 6.500 Mitarbeiterinnen und Mitarbeitern (einschließlich Klinikum rechts der Isar) und 22.000 Studierenden eine der führenden Universitäten Deutschlands. Ihre Schwerpunktfelder sind die Ingenieurwissenschaften, Naturwissenschaften, Lebenswissenschaften, Medizin und Wirtschaftswissenschaften. Nach zahlreichen Auszeichnungen wurde sie 2006 vom Wissenschaftsrat und der Deutschen Forschungsgemeinschaft zur Exzellenzuniversität gewählt. Das weltweite Netzwerk der TUM umfasst auch eine Dependence in Singapur. Die TUM ist dem Leitbild einer unternehmerischen Universität verpflichtet.

Technische Universität München Corporate Communications Center 80290 München www.tum.de

Dr. Ulrich Marsch	Sprecher des Präsidenten	+49.89.289.22778	marsch@zv.tum.de
Verena Saule M.A.	PR-Referentin	+49.89.289.22562	saule@zv.tum.de