

Ausschreibung Diplomarbeiten

Computersimulationen von Self-Assembly und Kristallisation von Proteinen

Beschreibung

Self-Assembly - die spontane und reversible Bildung von geordneten Strukturen und Mustern ohne äußere Einwirkung - ist das Prinzip, das der Strukturbildung in biologischen Systemen zugrunde liegt. Die Strukturen, die durch Selbstorganisation in der Natur entstehen, sind sehr vielfältig und reichen von Viruskapsiden, die sich spontan aus ihren Proteinbausteinen bilden, über die tertiäre Struktur von Proteinen, die sich aus der Proteinfaltung ergibt, bis hin zu den sogenannten S-Schicht Proteinen, die mittels Self-assembly zweidimensionale kristalline Hüllen von prokaryotischen Organismen bilden.

In der Nanotechnologie wird dieses Prinzip für die Entwicklung neuer Materialien genutzt. Diese neue Art von Materialien entsteht durch Self-assembly aus Bausteinen, deren Eigenschaften und Strukturen die Eigenschaften der Zielstruktur festlegen. Allerdings ist das Verständnis, welche Wechselwirkungen der Bausteine zu welchen Zielstrukturen führen, noch sehr unvollständig. Ziel der Diplomarbeit ist es mit Hilfe von theoretischen Methoden und Computersimulationen den physikalischen Mechanismus zu untersuchen, der die verschiedenen Zielstrukturen festlegt und den Übergang zwischen den Strukturen bestimmt. Einfache Modelle - so genannte patchy models, in denen die Bausteine über lokalisierte und räumlich gerichtete Kräfte wechselwirken, werden verwendet. Das Themengebiet einer weiteren Diplomarbeit ist die Untersuchung der kinetischen Eigenschaften von Self-Assembly: Wie geht der Selbstorganisationsprozess vor sich? Welche Zwischenstrukturen werden gebildet? Computersimulationen sollen hier Einblick liefern. Insbesondere ist es das Ziel der Arbeit auf mikroskopischem Niveau die Proteinnukleation zu untersuchen, bei der sich ein Proteinkristall aus einer metastabilen unterkühlten Flüssigkeit bildet. Um die unterschiedlichen Zeitskalen zu überbrücken sind hier spezielle Simulationsmethoden erforderlich.

Förderung

Forschungsbeihilfe (FWF) für zwei Diplomarbeiten für jeweils 12 Monate

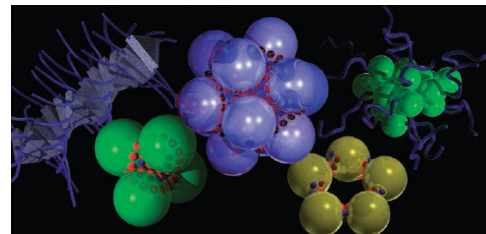
Voraussetzung

fortgeschrittenes Studium der Physik oder Mathematik

Kontakt

Dr Elisabeth Schöll-Paschinger
Institut für Verfahrens- und Energietechnik
Universität für Bodenkultur
Tel: 01-3709726-203
elisabeth.schoell-paschinger@boku.ac.at

Ao. Univ. Prof. Dr Gerhard Kahl
Institut für Theoretische Physik
Technische Universität Wien
gkahl@tph.tuwien.ac.at



Predicted self-assembled structures for model building blocks. From S.C. Glotzer: Some Assembly Required, *Science*, **306**, 319 (2004).