

Moleküldynamiksimulationen an licht- und spannungsabhängigen Enzymen

Kurzbeschreibung

Das Projekt „Moleküldynamiksimulationen an licht- und spannungsabhängigen Enzymen“ untersucht strukturelle und dynamische Eigenschaften von Enzymen mit Hilfe von Moleküldynamiksimulationen (MD). Die Berechnungen beschreiben u.a. das Verhalten von Biomolekülen an Oberflächen und Membranen in explizitem Lösungsmitteln. Da durch die Exzellenzinitiative „UniCat“ die Zusammenarbeit zwischen Theoretikern und Experimentatoren stark gefördert wird, sind die MD Simulationen häufig ein Ausgangspunkt für Spektrenberechnungen auf einem QM/MM Niveau, die mit experimentellen Daten verglichen und durch diese optimiert werden. Das Projekt dient vor allem dazu, einen detaillierten Einblick auf atomarer Ebene zu erhalten, der durch Experimente nicht oder nur äußerst aufwendig erhalten werden kann. Langfristig sollen die so erhaltenen Ergebnisse zur Entwicklung und zum Verständnis von biokatalytischen Verfahren beitragen.