

**Antrag auf Rechenzeit am HLRN für den Zeitraum
1. Juli 2011 – 30. Juni 2012 (1 Jahr)
Kurzfassung des Fortsetzungsantrags für das Großprojekt nic00016**

Prof. Dr. Marcus Müller
Institut für Theoretische Physik
der Georg-August-Universität
Friedrich-Hund-Platz 1, 37077 Göttingen

Göttingen, den 20. April 2011

Titel des Forschungsvorhabens:

**Kollektive Phänomene in Lipidmembranen:
Porenbildung, Fusion, und Wechselwirkung mit Peptiden und Oberflächen**

Beteiligte Wissenschaftler:	Prof. Dr. M. Müller (federführend), Dr. K. Ch. Daoulas, Dr. M. Fuhrmans, Dr. Y. G. Smirnova, Dipl.-Phys. M. Hömberg, M.Sc. G. Marelli
------------------------------------	--

Kollektive Phänomene in Lipidmembranen, wie z.B. der Phasenübergang von der flüssigen zur gelförmigen Phase, laterale Entmischung in mehrkomponentigen Membranen, Porenbildung und Fusion, sind für viele biologische Prozesse, wie z.B. „Rafts“, synaptische Ausschüttung, Endo- und Exocytose und Virusinfektionen, von grundlegender Bedeutung. Einsichten in die zugrundeliegenden molekularen Abläufe sind jedoch nur begrenzt verfügbar, da die Zeit- und Längenskalen – Mikrosekunden und Mikrometer – oft zu klein für eine direkte experimentelle Beobachtung, aber zu groß für detaillierte atomistische Simulationen sind. Hier können vergrößerte Modelle einen wichtigen Beitrag leisten, da sie die relevanten Skalen untersuchen und da die Phänomene in diesem Bereich einen hohen Grad an Universalität aufweisen, d.h. experimentelle Realisationen mit sehr unterschiedlichen Wechselwirkungen ein qualitativ ähnliches Verhalten zeigen. Dies legt nahe, dass die atomistischen Details nicht über das qualitative Verhalten auf mesoskopischen Skalen entscheiden.

In unserer Gruppe wurde ein solches vergrößertes, lösungsmittelfreies Modell zur Simulation von Lipidmembranen entwickelt. Im vergangenen Jahr haben wir dieses Modell auf seine Eignung zur Beschreibung dynamischer Eigenschaften hin untersucht, und um eine stark vereinfachte Beschreibung von Membranproteinen ergänzt. Im kommenden Jahr soll nun die gegenseitige Beeinflussung verschiedener während der Fusion von Membranen auftretender Zwischenzustände und der Einfluss von Proteinen auf diese untersucht werden. Zudem soll die Adsorption und Ausbreitung von Vesikeln an Oberflächen simuliert werden.