

**Antrag auf Rechenzeit am HLRN für den Zeitraum
1. Juli 2010 – 30. Juni 2011 (1 Jahr)
Fortsetzungsantrag für das Großprojekt nic00016**

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

Göttingen, den 27. April 2010

Titel des Forschungsvorhabens:

**Kollektive Phänomene in Lipidmembranen:
Dynamik und die Rolle von Peptiden bei der Porenbildung und Fusion**

Beteiligte Wissenschaftler: Prof. Dr. M. Müller (federführend),
Dr. K. Ch. Daoulas,
Dr. M. Fuhrmans,
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 zeigen ein qualitativ ähnliches Verhalten. Dies legt nahe, dass die atomistischen Details nicht über das qualitative Verhalten auf mesoskopischen Skalen entscheiden.

Im vergangenen Jahr haben wir ein vergrößertes, lösungsmittelfreies Modell für die Simulation von polymerischen und Lipidmembranen entwickelt und viele Eigenschaften, wie das Phasendiagramm und das elastische Verhalten, mittels DPD-Simulationen untersucht und an Experimente angepasst. Dieses soll in zwei Richtungen weiterentwickelt werden: (i) Durch eine genaue Berücksichtigung der unterschiedlichen Dissipationsmechanismen auf verschiedenen Zeitskalen soll eine realistischere Lipiddynamik erzeugt werden, so dass unser Modell auch zur qualitativen Beschreibung von Nichtgleichgewichtsexperimenten eingesetzt werden kann. (ii) Es soll ein einfaches Modell zur Beschreibung von Peptiden entwickelt werden, um die Wirkung dieser auf die Fusion von Membranen zu untersuchen.