

Molekülen beim Arbeiten zusehen

Dietmar Paschek entwickelt Methoden im Bereich der Computerchemie / Simulationen verdeutlichen chemische Prozesse

ROSTOCK Dietmar Paschek weiß, wie Moleküle funktionieren. Der Wissenschaftler gehört zu den wenigen Experten in Deutschland, die sich mit Computersimulationen chemischer Prozesse auskennen. Seine Arbeitsgruppe an der Universität Rostock benutzt Computersimulationen als eine Art Supermikroskop mit Superzeitlupe. Mit einem Computer-Cluster mit mehr als 1200 Prozessoren können so die Bewegungen von Molekülen sichtbar gemacht werden. „Computersimulationen veranschaulichen chemische Reaktionen, wie sie auch in der Natur oder im Reagenzglas ablaufen“, sagt Dietmar Paschek von der Abteilung Theoretische und Physikalische Chemie der Universität Rostock. „Dass wir wissen, wie Proteine genau mit ihrer Umgebung in Wechselwirkung treten, ist die Voraussetzung, um unter anderem Krankhei-



Experiment im virtuellen Labor: Dr. Dietmar Paschek arbeitet im Bereich der Computerchemie. FOTO: UNI ROSTOCK

ten zu verstehen“, ergänzt er. Dietmar Paschek entwickelt Methoden im Bereich der Computerchemie und molekulardynamischen Simulationen. „Die Computersimulation ist ein relativ neues Werkzeug im Werkzeugkasten der Chemiker“, erklärt der 46-Jährige. Seit

drei Jahren bemüht er sich, dass chemische Vorgänge im virtuellen Labor nachvollzogen werden können. „Wenn wir verstehen wollen, wie die chemischen Vorgänge auf der Molekülebene ablaufen, ist es am besten, wenn wir den Molekülen direkt dabei zusehen können.“

Erst in diesem Jahr haben die Amerikaner Martin Karplus, Michael Levitt und Arieh Warshel den Chemie-Nobelpreis für die Entwicklung von Computermodellen erhalten, die chemische Prozesse realistisch abbilden. Dietmar Paschek hat seine Doktorarbeit in Physikalischer Chemie bei Professor Alfons Geiger an der Universität Dortmund geschrieben. Dieser gilt als Pionier der Simulationstechnik in Deutschland. Paschek hat mit Auszeichnung bestanden. „Im Prinzip können wir mit unseren molekulardynamischen Simulationen

sämtliche lebensrelevanten molekularen Prozesse beschreiben“, meint der Wissenschaftler. „Experimente der Computerchemiker im virtuellen Labor werden künftig immer wichtiger“, ist Dietmar Paschek überzeugt.

Mit seiner Arbeitsgruppe wird er sich auch zukünftig damit beschäftigen, wie die Stabilität von Biomolekülen beeinflusst werden kann. Erste Beobachtungen hat er schon gemacht. So verändert ein Protein in wässriger Lösung seine Struktur, wenn Harnstoff hinzugegeben wird. Das Protein entfaltet sich. Dietmar Paschek bezeichnet diese Reaktion als „bemerkenswert“. Die Ursache aber für diese schon seit mehr als 100 Jahren bekannte Reaktion war nie genau verstanden worden. „Erst mit Hilfe der Computersimulation haben wir aufklären können, was da genau passiert“, so der Chemiker. NNN