Deutsche Gesellschaft für Biophysik e.V.
- Der Sekretär -

Rundschreiben 1/2008

Inhalt

1. In eigener Sache
2. Grußwort des Vorsitzenden der DGfB, Prof. Dr. Klaus Peter Hofmann
3. Protokoll der Mitgliederversammlung 2008
4. Tagungsberichte
5. Tagungshinweise
6. Mitglieder

Anschrift des DGfB-Sekretariats:

Prof. Dr. Ulrike Alexiev
Freie Universität Berlin
Fachbereich Physik
Arnimallee 14
D-14195 Berlin, Germany

Fon: ++49-30-83855157
Fax: ++49-30-83856510
alexiev@physik.fu-berlin.de
www.physik.fu-berlin.de/~alexiev

Konto der DGfB: Dresdner Bank AG; (Filiale Frankfurter Straße 4, 35332 Gießen)
Konto-Nr. 915 684 700 BLZ: 513 800 40

1. In eigener Sache

Liebe Mitglieder der DGfB!

Wie Sie alle wissen, haben wir auf der letzten Mitgliederversammlung in Berlin den neuen Vorstand und damit auch einen neuen Vorsitzenden der Gesellschaft, Uli Nienhaus, gewählt. Ich möchte mich daher an dieser Stelle recht herzlich bei dem scheidenden Vorsitzenden, Klaus Peter Hofmann, für die Zusammenarbeit in den letzen beiden Jahren bedanken, die mir immer viel Spaß gemacht hat. Seine „Quo vadis Biophysik“ - Beiträge haben entscheidend zur Standortbestimmung der Biophysik beigetragen.

Ich möchte hier die Gelegenheit auch kurz nutzen, den Ausrichterinnen der Sektionstagungen „Gomadingen 2008“ und „Hünfeld 2007“ zu danken. Beide Tagungen waren wieder sehr gut besucht. In diesem Zusammenhang möchte ich auch dem Ausrichter der Jahrestagung 2008, Holger Dau, ganz herzlich für sein Engagement bei der erfolgreichen Organisation der Jahrestagung danken.

Besonders stolz bin ich darauf, dass es uns gelungen ist, im Zuge der Jahrestagung über 50 neue Mitglieder zu werben. Vor allem das Interesse aus der Gruppe der jüngeren Wissenschaftler und Doktoranden zeugt davon, dass die Biophysik weiterhin ein offensichtlich spannendes und attraktives Gebiet ist.

In diesem Sinne wünsche ich Ihnen persönlich alle Gute für 2009 sowie eine erfolgreiche Forschung, mit viel Spaß und neuen Erkenntnissen!

Mit den besten Grüßen
Ulrike Alexiev
-Sekretär der DGfB-

2. Grußwort des Vorsitzenden der DGfB, Prof. Dr. Klaus Peter Hofmann

Biophysik – einige Gedanken zur Rolle und Förderung des Faches

Klaus Peter Hofmann (kph@charite.de)

In meinem Versuch einer Standortbestimmung der Biophysik (nachzulesen unter http://www.dgfb.org/german/german_neu_aktuelles.html#2 oder http://www.vbio.de/der_vbio/fachgesellschaften/dgfb_biophysik/index_ger.html) habe ich im letzten Jahr bereits darauf hingewiesen, dass die Bewilligungsquote für biophysikalische Projekte im DFG-Normalverfahren bei über 30% liegt. Sie ist inzwischen noch höher geworden. Dies ist zunächst gut für uns, denn das Normalverfahren mit seiner mehrstufigen sorgfältigen Begutachtungsprozedur ist für uns in Zeiten, in denen allzu oft das Offensichtliche, Konsensfähige, jedermann Vermittelbare im Vordergrund steht, äußerst wichtig. Die Biophysik steht ja gerade für das manchmal Schwierige, oft auch Neue und Unerwartete. Die an sich so günstigen Förderquoten im Normalverfahren bergen aber auch eine große Gefahr. Sie bedeuten nämlich letzten Endes, dass zu wenig beantragt wird. Die Verteilung der Mittel in der DFG auf die verschiedenen Fachkollegien ist keine Naturkonstante, sondern regelt sich langfristig durch die Zahl und Qualität der im jeweiligen Panel gestellten Anträge. Früher oder später wird z. B. dann, wenn die Förderquoten im Fachkollegium „Philosophie“ niedriger sind (der sog. Antragsdruck also höher ist), mehr Geld dorthin fließen. In der Folge wird das für uns u. a. relevante Kollegium „Grundlagen der Biologie und Medizin“ weniger Geld bekommen. Und eine Reduktion ist sehr schwer wieder rückgängig zu machen.

Wie ich gehört habe, ist auch der Mittelabruf aus laufenden Projekten des Normalverfahrens z. T. sehr schleppend. Da Mittel hier ins jeweils nächste Jahr übertragen werden können, tendiert man dazu, sich eine Sparkasse anzulegen. Eine solche Praxis bringt aber die DFG gegenüber den Geldgebern in Schwierigkeiten und sollte vermieden werden.

Und noch ein Gedanke zur Rolle der Biophysik: das Fach wird gern als Würze in Verbundprojekte mit eingebunden, ist aber regelmäßig bei den „gefährdeten Arten“, wenn es z. B. um die Widmung von Lehrstühlen geht. Es ist also besonders wichtig, den Stellenwert unseres Faches mindestens zu erhalten, oder besser noch zu steigern. Nach meinen Beobachtungen haben sich dabei einige einfache Rezepte bewährt:

- in einigen (sinnvollen) Gremien präsent sein -
- junge Leute auch in interdisziplinären Milieus von Anfang an entschlossen an die biophysikalische Denkweise heranführen, so dass sie sehen, welches Privileg es ist, ein biologisches Problem mit all seinen quantitativen Implikationen zu lösen -
- selbst Forschergruppen oder Sonderforschungsbereiche gründen - interdisziplinär aber mit quantitativem Anspruch - es geht besser als man denkt, und Mut wird belohnt: ein SFB behält seinen Wert über viele Jahre -
- auf möglichst hohem Niveau publizieren - nur entsprechende Sichtbarkeit führt dazu, dass sich Kollegen mit biophysikalischer Ausrichtung gegenüber noch nicht festgelegten Kommissionen bei der Stellenbesetzung durchsetzen.

Ich werde in diesem Jahr 65 Jahre alt; obwohl noch weiter aktiv, werde ich nicht für eine zweite Amtszeit kandidieren, sondern als 2. Vorsitzender dem neuen 1. Vorsitzenden Uli Nienhaus, der ab 01. Januar 2009 das Amt übernimmt, zuarbeiten. Ich danke allen Kollegen der DGfB für eine schöne und anregende Zeit als Vorsitzender der DGfB.

KPH

3. Protokoll der Mitgliederversammlung 2008

Protokoll der 37. Ordentlichen Mitgliederversammlung

Montag, 29. September 2008 um 19.00 Uhr
im Großen Hörsaal, Arnimallee 22, Berlin

Teilnehmer gem. Anwesenheitsliste: 58

TOP 1 Eröffnung und Begrüßung durch den 1. Vorsitzenden Feststellung der Tagesordnung

Der Vorsitzende der Deutschen Gesellschaft für Biophysik, Herr Prof. Dr. Klaus-Peter Hofmann, eröffnet die Sitzung und begrüßt die anwesenden Mitglieder. Ferner dankt er den Organisatoren aus Berlin für die hervorragende Ausrichtung dieser Jahrestagung.
Zur Tagesordnung gibt es keine Einwände oder Ergänzungen, so dass der Vorsitzende die Tagesordnung als genehmigt feststellt.

TOP 2 Protokoll der 36. Ordentlichen Mitgliederversammlung in Mainz

Das Protokoll ist den Mitgliedern der Gesellschaft mit der Einladung zur Mitgliederversammlung zugegangen. Es gibt keine Einwände oder Ergänzungen, so dass das Protokoll einstimmig angenommen wird.

TOP 3 Berichte des 1.Vorsitzenden, des Sekretärs und des Kassenführers

<u>Bericht des Vorsitzenden</u>

Der derzeitige Vorsitzende berichtete über den Zeitraum seit seinem Amtsantritt am 01.01.2007. Zu Beginn seines Berichtes hob er den Erfolg der Sektionstagungen, sowie den erfreulichen Verlauf der Jahrestagung hervor, und brachte seine Freude über die vielen neuen Mitglieder der Gesellschaft zum Ausdruck.
Er berichtete dann von folgenden Aktivitäten:

1. Vorschläge für die DFG-Gutachterausschüsse

Die DGfB war aufgerufen, Vorschläge zur Wahl der neuen Mitglieder der Gutachterausschüsse für das DFG-Normalverfahren zu machen. Die meisten Vorschläge wurden mit anderen vorschlagsberechtigten Fachgesellschaften und Kollegen abgestimmt. Der Vorsitzende war im Namen der DGfB und im Einvernehmen mit dem Vorstand für folgende Fächer vorschlagsberechtigt:

201-02 Biophysik 5 Vorschläge (bei 4 Kollegiaten)
201-04 Strukturbiologie 5 Vorschläge (bei 4 Kollegiaten)
202-05 Biochemie und Biophysik der Pflanzen 3 Vorschläge (bei 2 Kollegiaten)

Die meisten der von der DGfB vorgeschlagenen Kollegen wurden gewählt. Die Interessen der Gesellschaft sind also in den Gutachterausschüssen gut vertreten.

2. Preis der European Biological Societies Association (EBSA)

Für diesen Preis wurde vom 1. Vorsitzenden im Namen der DGfB Marc Baldus, Göttingen vorgeschlagen. Er hat den Preis erhalten. Die DGfB gratuliert ihm herzlich.

3. Dachgesellschaften

IUPAB - Das Joint Meeting der *International Union ofor Pure and Applied Biophysics* (IUPAB) und der *US Biophysical Society* fand vom 2-6 Januar 2008 in Long Beach, USA statt. Dieser Kongress ist die bedeutendeste Aktivität der IUPAB. Er findet alle drei Jahre statt, im Jahr 2005 war er in Montpellier (Frankreich), 2008 in Long Beach, und 2011 wird er in in Peking, China sein. In Long Beach nahmen 5500 Kollegen aus 54 Ländern teil, davon 50% aus den USA. Während des Kongresses traten das Executive Committee, zwei Councils und die Generalversammlung zusammen.

Gerd Ulrich Nienhaus wurde vom 1. Vorsitzenden der DGfB als Council Member nominiert und bei der Generalversammlung gewählt. Als Vertreter der DGfB waren bei dieser Fritz Parak, Uli Nienhaus und Klaus Peter Hofmann anwesend. Der Vorsitzende gratuliert Uli Nienhaus zur Wahl und dankt Fritz Parak für die geleistete Arbeit.

VBIO - Die DGfB ist eine der Fachgesellschaften des VBIO. Der Verband Biologie, Biowissenschaften und Biomedizin ist das gemeinsame Dach für alle, die in den Bereichen Biologie, Biowissenschaften und Biomedizin tätig sind: in Hochschule, Schule, Industrie, Verwaltung, Selbstständigkeit oder Forschung. Die Mitglieder des VBIO vertreten das gesamte Spektrum der Biowissenschaften; von der molekularen, zellulären oder der am Organismus orientierten Herangehensweise bis hin zur Biomedizin. Die Einzelmitglieder setzen sich etwa wie folgt zusammen: 30% Hochschulangehörige, 30% Lehrer, 10% sonstige.

Der Verband Biologie, Biowissenschaften und Biomedizin (VBIO e. V.) entstand 2007 durch den Zusammenschluss des Verbandes Deutscher Biologen und biowissenschaftlicher Fachgesellschaften (vdbiol e. V.) und des Verbundes biowissenschaftlicher und biomedizinischer Gesellschaften (vbbm e. V.). Im VBIO sind erstmals 5.000 individuelle Mitglieder, über 30.000 Mitglieder in den Fachgesellschaften sowie über 80 Firmen und Institutionen unter einem gemeinsamen Dach vereint. Prof. R. Balling ist erster, Prof. R. Paulsen zweiter Vorsitzender. Ein Jahresbericht findet sich unter www.vbio.de. Die 1. Bundesdelegiertenversammlung des VBIO am fand 14. Juni in Berlin-Buch statt. Der 1. Vorsitzende hat die DGfB bei dieser Versammlung vertreten.
Als Aufgaben des VBIO wurden genannt und diskutiert:
Bildung, Ausbildung, Beruf fördern - Forschungsbedingungen verbessern - Politische Entscheidungsprozesse mitgestalten - Verständnis für Biowissenschaften und Dialog Wissenschaft/ Öffentlichkeit stärken.

Die Zeitschrift *Biologie in unserer Zeit (BIUZ*) ist nunmehr Verbandsorgan. *Biologen heute* wird fortgeführt. Bezüglich der Gehaltsentwicklung von in der Biologie tätigen

Wissenschaftlern wurde eine Angleichung an die vom Marburger Bund für Ärzte erreichten Verbesserungen diskutiert. Diskutierte Ideen für Aktivitäten des VBIO waren eine „Biologie Olympiade“ und eine Sommerakademie.
Es wurde angeregt, dass möglichst viele Mitglieder von Fachgesellschaften auch persönliche Mitglieder im VBIO werden sollten.

GBM Der Vorsitzende der Sektion Biophysikalische Chemie Claus Seidel nahm an unserer Vorstandssitzung teil. Es wurde eine engere Zusammenarbeit, insbesondere bei der Jahrestagung der DGfB, vereinbart.

DPG Uli Nienhaus ist stellv. Vorsitzender der DPG und der DGfB. Aus dieser Personalunion ergeben sich sehr gute Chancen der Zusammenarbeit zwischen den Gesellschaften.

4. Ein besonderes Anliegen

Der 1. Vorsitzende trug zum Abschluss seines Berichtes einige Gedanken zur Rolle und Förderung der Biophysik vor, die in dem diesjährigen Rundschreiben als Teil des Grußwortes abgedruckt sind.

5. Beendigung der Amtszeit

Der 1. Vorsitzende gab bekannt, dass er nicht für eine weitere Amtszeit kandidieren werde. Satzungsgemäß wird er damit einer der beiden 2. Vorsitzenden. Er wird in dieser Rolle dem neuen 1. Vorsitzenden zuarbeiten. Er dankte zum Abschluss allen, insbesondere den Kollegen im Vorstand für die harmonische und gedeihliche Zusammenarbeit.

Bericht des Sekretärs

Mitgliederzahlen:

Die Mitgliederzahl beträgt aktuell 465. Es wurden Anfang des Jahres an alle Mitglieder Mitgliedsnummer ausgegeben.
Auch im Zuge der Anmeldung zur Jahrestagung sind 55 neue Aufnahmeanträge eingegangen. Es gab keine Einwände gegen die Aufnahme der 55 neuen Mitglieder.

Tagungen/Reisestipendien

Mitglieder des Vorstandes haben an der EBSA Tagung (Alexiev) in London und an der IUPAB Tagung (Hofmann, Nienhaus) in Long Beach teilgenommen.

Die DGfB hat an 8 Nachwuchswissenschaftler Reisestipendien in Höhe von je 300 € zur Konferenzteilnahme an der EBSA Tagung in London 2007 vergeben:

Barbara Windschiegl bwindsc@uni-goettingen.de	***Dipl.-Chemikerin, Doktorandin***	***AG Steinem, Göttingen***
Anna-Lena Idzko Anna-Lena.Idzko@physik.uni-augsburg.de	***Diplomandin (Physik)***	***AG Schneider, Augsburg***
Teresa Neumaier teresa.neumaier@physik.uni-augsburg.de	***Dipl.-Physikerin Doktorandin***	***AG Thalhammer, München***
Julia Holterhus j.holterh@uos.de	***Dipl.-Physikerin Doktorandin***	***AG Steinhoff, Osnabrück***
Jennifer Angerer	***Diplomandin (Physik)***	***AG Schneider, Augsburg***
Beate Griepernau b.griepernau@bioinformatik.uni-saarland.de	***Dipl.-Physikerin Doktorandin***	***AG Böckmann, Saarbrücken***
Ingo Mey Ingo.mey@uni-mainz.de	***Dipl.-Chemiker, Doktorand***	***AG Janshoff, Mainz***
Matthias Elgeti Matthias.Elgeti@charite.de	***Dipl.-Physiker Doktorand***	***AG Bartl, Berlin***

Der 1. Posterpreis wurde an **Teresa Neumaier** verliehen und ein weiterer weiterer Posterpreis ging an **Beate Griepernau.** Beiden Preisträgern wurde durch das DGfB-Reisestipendium die Teilnahme an der EBSA-Tagung ermöglicht.
Der Sekretär gratuliert.
Die nächste gemeinsame Tagung „7th European Biophysics Congress“ findet vom 11.-15.07. 2009 in Genua statt. Informationen finden sich unter www.ebsa2009.org

Weitere EBSA-Aktivitäten:

Das Treffen der nationalen Repräsentaten mit dem EBSA Executive committee fand am 11. Januar 2008 in Genua statt.

Es wurden folgende Arbeitsgruppen gebildet:

- Promotion of the European Biophysics Journal
- Encyclopaedia of Biophysics
- Development of Biophysics Courses „EBSA Courses“
- Exchange of joung biophysisists across europe

Mitglieder der DGfB koennen über das Springer-Portal: www.springer.com/ebsa
30% Diskount für alle Springer Bücher mit DGfB Springer Token:
acR8GazaqD5aFWh (gültig bis 31. Dezember 2009) erhalten.

Bericht des Kassenwartes

Geschäftskonto der Deutschen Gesellschaft für Biophysik
Geschäftsjahr 2006 - Dresdn. Bank - Kto 915684700, BLZ 51380040

Einnahmen- und Ausgabenrechnung - 01.01.-31.12.2006

Einnahmen	
Mitgliedsbeiträge durch Überweisungen	225,90 €
Mitgliedsbeiträge durch Lastschrifteneinzug	8.229,00 €
Fehlbuchungen	180,00 €
Spenden	2.500,00 €
Rückzahlung, Tagung Gomadingen	591,54 €
SUMME	**11.726,44 €**

Ausgaben	
Rundschreiben DGFB, Erstellung, Kopien	1.434,31 €
Büromaterial	26,22 €
Webpage	60,00 €
VBBM-Beitrag 2006	842,00 €
EBSA Beitrag 2005/2006	1.710,50 €
Posterpreise	600,00 €
Unterstützung Tagung Freiburg 2004	581,00 €
Unterstützung Tagung Gomadingen 2006	3.300,00 €
Reisekosten Vorstand, Mainz, Vorstandssitzung	1.096,35 €
Retour Lastschrift wg. Konto erloschen	487,08 €
Fehlbuchung 2006	160,00 €
Dresd.-Bank - Kontoabschluss	306,48 €
SUMME	**10.603,94 €**

Kontostand 31.12.2005	25.290,19 €
Einnahmen 2006	11.726,44 €
insgesamt	37.016,63 €
Ausgaben 2006	10.603,94 €
Kontostand 31.12.2006	26.412,69 €

Termingeld	Kontostand 11.12.06	Hypo-Bank Kto-Nr. 6702117400	31.499,40 €
Girokonto	Kontostand 31.12.06	Hypo-Bank Kto-Nr. 6700211744	76,52 €

Geschäftskonto der Deutschen Gesellschaft für Biophysik
Geschäftsjahr 2007 - Dresdn. Bank - Kto 915684700, BLZ 51380040

Einnahmen- und Ausgabenrechnung - 01.01.-31.12.2007

Einnahmen	
Mitgliedsbeiträge durch Überweisungen	120,90 €
Mitgliedsbeiträge durch Lastschrifteneinzug	7.986,00 €
Rücküberweisung Reisestip. wg. falscher Kto-Nr.	300,00 €
Rückzahlung Tagung Hünfeld 2005	2.000,00 €
Rückzahlung Tagung Mainz 2006	6.000,00 €
SUMME	**16.406,90 €**
Ausgaben	
Rundschreiben DGfB, Erstellung, Kopien	1.547,25 €
Portokosten	86,92 €
Vereinsregister-Anmeldung	26,68 €
Unterstützung Tagung Hünfeld 2007	2.000,00 €
Unterstützung Physikerinnen -Tagung DPG 2007	500,00 €
Reisestipendien EBSA London	2.700,00 €
Reisekosten Vorstand, EBSA, Vorstandssitzungen	1.888,89 €
Retour Lastschrift wg. Konto erloschen	293,16 €
Dresd.- Bank - Kontoabschluss	292,41 €
SUMME	**9.335,31 €**
Kontostand 31.12.2006	26.412,69 €
Einnahmen 2007	16.406,90 €
insgesamt	42.819,59 €
Ausgaben 2007	9.335,31 €
Kontostand 31.12.2007	33.484,28 €

Termingeld	Kontostand 17.12.2007	Hypo-Bank Kto-Nr. 6702117400	32.527,41 €
Girokonto	Kontostand 31.12.2007	Hypo-Bank Kto-Nr. 6700211744	76,52 €

Die Kassenprüfer haben die die Bilanz geprüft und keine Beanstandungen.

Der Kassenführer schlägt vor, den Betrag von Euro 32.527,41 als Rücklage zur Absicherung der finanziellen Risiken der kommenden Jahrestagung zu verwenden. Dieser Vorschlag wird ohne Gegenstimmen angenommen.

TOP 4 Berichte aus den Sektionen

Sektion 1 Molekulare Biophysik (Sprecher: Prof. Dr. P. Hellwig)

Die Tagung der Sektion Molekulare Biophysik fand im Geistlichen Zentrum des Klosters St. Bonifatius vom 17.-20. Mai 2007 statt. Ca. 70 Teilnehmer aus dem In- und Ausland trafen sich zum Thema „Time and space resolved methods in molecular

biophysics“. Die Beiträge zu dieser Tagung haben aktuelle Fragestellungen der molekularen Biophysik mit Zeit- und Ortsaufgelösten Methoden, einschließlich theoretischer Ansätze, aufgegriffen. Aus der großen Fragestellung zur Struktur-Funktions- und Dynamik-Beziehung, sind Beiträge zur Protein-Protein und Protein-Ligand Wechselwirkung, Signalübertragung, Assemblierung und Regulation eingegangen. Weiterhin wurden methodische Aspekte diskutiert.
Es beteiligte sich die Ungarische Biophysikalische Gesellschaft. Die Tagungskosten konnten mittels eines DFG Projektes, sowie durch die finanzielle Unterstützung durch die DGfB, niedrig gehalten werden. Nachwuchswissenschaftler wurden finanziell stark entlastet. In der der Mitgliederversammlung vorangegangenen Sektionssitzung wurde die jetzige Stellvertretende Sektionssprecherin PD Dr. N. Hellmann als zukünftige Sektionssprecherin und der zukünftige Stellvertetende Sprecher Dr. Rainer Böckmann ohne Gegenstimmen bestätigt.

Sektion 2 Sektion Membranen, Zellen, Netzwerke (Sprecher: Prof. Dr. C. Steinem)

Wie traditionsgemäß alle zwei Jahre fand auch in diesem Jahr vom 31.03.-02.04.2008 der Workshop der Sektion: „Membranen, Zellen, Netzwerke“ in Gomadingen statt. Das diesjährige Thema: “*Mechanical and Electrical Properties of Artificial and Cellular Membranes*“ brachte rund 100 Wissenschaftler aus dem In- und Ausland zusammen. Der Workshop war organisiert in zwei Abendvorträgen, die von Herrn Prof. Antonov (Moskau, Russland) und Herrn Prof. Chernomordik (Bethesda, USA) gehalten wurden, sowie sieben thematischen Blöcken mit jeweils einem Hauptvortragenden und drei Kurzvorträgen, die aus den eingereichten *Abstracts* ausgewählt wurden. Das reichhaltige Programm umfaßte folgende Themenschwerpunkte:
Elektrische und mechanische Eigenschaften von Membranen
Neue Methoden zur Untersuchung mechanischer und elektrischer Eigenschaften von Membranen
Experimentelle und theoretische Ansätze zu Membrandeformationen
Membranmechanik zellulärer Systeme
Membranen an Grenzflächen
Dabei kamen auch die Postersessions bei Bier und Wein an beiden Abenden nicht zu kurz. Inspiriert durch die anregenden wissenschaftlichen Gespräche wurde der zweite Abend zudem durch eine kontroverse Diskussionsrunde bereichert. Den körperlichen Ausgleich schaffte die etwa dreistündige Wanderung rund um das Feriendorf Gomadingen.
Die Teilnahme am Workshop wurde auch in diesem Jahr durch eine subventionierte Tagungsgebühr erleichtert. Dies war nur durch großzügige externe Sponsoren (Belltec, JPK, Nanion, Nima,) sowie durch eine Unterstützung durch die DFG und den Fonds der Chemischen Industrie möglich, wofür wir uns im Namen aller Teilnehmer nochmals herzlich bedanken möchten. So war der Workshop in Gomadingen wieder ein besonderes Erlebnis.

Etablierung einer neuen Sektion 3

Nach einer langen und intensiven Diskussion über den Namen und Sinn einer neuen Sektion 3 „Medizinische Biophysik“ wurde das Thema „Biophysik der Zellen und Organe“ vorgeschlagen. Nach Austritt aus der Tagungsordnung auf Antrag von G.U. Nienhaus, wurde ein Tagesordnungspunkt 4a zur Abstimmung über die Gründung

einer neuen Sektion 3 vorgeschlagen und angenommen. Die Gründung einer neuen Sektion 3 wurde mehrheitlich beschlossen. Es wurden Peter Pohl und Oliver P. Ernst von der Mitgliederversammlung beauftragt, als kommissarische Sprecher die neue Sektion mit Leben erfüllen und ein thematisches Konzept auszuarbeiten.

TOP 5 Entlastung des Vorstandes

Paul Tavan beantragt auf Grund der Berichte und der vorgelegten Bilanz den Vorstand zu entlasten. Der Antrag wird einstimmig angenommen. Der Vorstand ist somit entlastet.

TOP 6 Wahl des neuen Vorstandes (01. 01. 2009 - 31. 12. 2010) und der Sektionssprecher

Der Wahlleiter Paul Tavan erläutert, dass ein neuer Vorstand gewählt werden muß. Nach der Satzung ist der bisherige Vorsitzende satzungsgemäß Stellvertreter, so dass ein neuer 1.Vorsitzender, ein weiterer Stellvertreter und ein Kassenwart gewählt werden muß. Der Vorsitzende erläutert den Vorschlag des Vorstandes und bittet um weitere Vorschläge. Da diese nicht vorliegen, stehen nachfolgende Mitglieder zur Wahl:

- Vorsitzender: G.U.Nienhaus (Ulm)
- Stellvertreter: H.J. Galla (Münster)
- Kassenführer: D. Huster (Halle)

Die schriftliche und geheime Wahl ergibt folgendes Ergebnis

- U. Nienhaus 41 ja 2E
- H.J. Galla 41 ja 1E 1nein
- D. Huster 42 ja 1nein

Der neue Vorstand wird zum 01.01.2009 seine Aufgaben übernehmen. Der Wahlleiter und der Vorsitzende gratulieren dem neuen Vorstand zu seiner Wahl und dankt den ausscheidenden Mitgliedern für ihre Arbeit.

Auf Vorschlag der Sektionen werden folgende Sprecherinnen/Sprecher einstimmig gewählt:

Sektion 1 - Molekulare Biophysik (Bisherige Sprecherin: Petra Hellwig, Strassburg)

Sprecherin Nadja Hellmann (Mainz) für die Jahre 2009-2010
stellvertr. Sprecherin Rainer Böckmann (Saarbrücken) für die Jahre 2009-2012

Sektion 2 - Membranen, Zellen, Netzwerke (bisherigere Sprecherin: Claudia Steinem, Göttingen)

Sprecher: Matthias Schneider (Augsburg) für die Jahre 2009-2010

stellv.Sprecher: Thomas Gutsmann (Borstel) für die Jahre 2009-2012

TOP 7 Jahrestagung 2010, 7thEuropean Biophysics Congress 2009 Genua

Es wird um Vorschläge für die Jahrestagung der DGfB 2010 gebeten. Prof. Gerwert aus Bochum erklärt sich grundsätzlich bereit, diese Aufgabe zu übernehmen.
Es wird zum Abschluss noch einmal auf die Europäische Biophysik-Tagung 2009 in Genua hingewiesen, die im zweijährigen Rythmus, abwechselnd zur DGfB Jahrestagung stattfindet.

Berlin, den 18. Dezember 2008

Prof. Dr. Klaus-Peter Hofmann
1. Vorsitzender

Prof. Dr. Ulrike Alexiev
Sekretär

4. Tagungsberichte: Jahrestagung 2008 in Berlin

Die Jahrestagung 2008 fand vom 28. September bis 1. Oktober 2008 in Berlin statt. Über 300 Teilnehmer, sowie 54 Vorträge und über 200 Posterpräsentationen in den Bereichen „*Biological function at the atomic level*“; „*Membranes, cells, nanobiophysics, forces*“; und „*Theoretical biophysics*“ trugen zu einer anregenden Tagungsatmosphäre bei.
Sechs Posterpreise wurden ausgelobt, die an die Poster von Oliver Hucke, Martin Linke, Patrick Scheerer, Jennifer Angerer, Andrea Grafmüller und Alexandre Tkatschenko vergeben wurden:

Herzlichen Glückwunsch!

On the function of reaction center bound cytochrome *c* from photosynthetic bacteria

Oliver Hucke[1], Gernot Kieseritzky[2], Ernst-Walter Knapp[2], Stefan Herter[3], Gerhart Drews[3] and Andreas Labahn[1]*

[1]Universität Freiburg, Institut für Physikalische Chemie, Albertstr. 23 a, 79104 Freiburg, Germany

[2]Freie Universität Berlin, Institut für Chemie und Biochemie, Fabeckstrasse 36 a, 14195 Berlin, Germany

[3]Universität Freiburg, Institut für Biologie II, Mikrobiologie, Schänzlestr. 1, 79104 Freiburg, Germany

*Correspondence to Andreas.labahn@physchem.uni-freiburg.de

Introduction

Heme cofactors are ubiquitous in enzymes. Their redox capability plays a key role in enzymatic reactions, but also as electron carrier and in mediating electron transfer (ET) processes. The functional role of tetraheme cytochrome *c* (CytC) firmely attached to bacterial reaction centers (RC) in anoxygenic photosynthesis is unclear. Photosynthetic bacteria that deploy CytC are still capable of growing photosynthetically if the gene coding for CytC (*puf*C) is knocked out. However, expression of CytC increases the local electron concentration when environmental electron donors are scarce. Furthermore, the use of the "roller coaster" ET chain conserved in all tetraheme CytC still remains a riddle after decades of research [Fig. 1]. This study tries to shed new light on the role of CytC in purple bacterial reaction centers:

Crystal structures of RC with a tetraheme cytochrome *c* are solved to atomic resolution for *Blastochloris* (*Blc.*)*viridis* [1] and *Thermochromatium* (*Tch.*) *tepidum*, but midpoint potentials of the hemes were only specified for *Blc. viridis*. For *Roseobacter* (*Rsb.*) *denitrificans* the heme midpoint potentials were determined experimentally by Garcia et al. [2] but no three-dimensional structure of the RC is available for this organism.
In this work we investigated energetics and kinetics of ET in the tetraheme cytochrome *c* (CytC) firmely attached to bacterial reaction centers for two species: *Blc. viridis* where a crystal structure is available and *Rsb. denitrificans* where the structure was modeled.

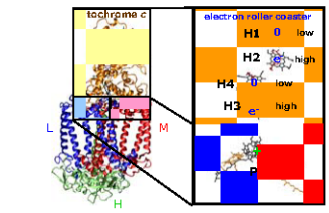


Figure 1: X-ray structure of the RC from *Blc. viridis*.

Under physiological conditions, the two high potential hemes (H2, H3) hold an electron while the two low potential hemes (H1, H4) are in the oxidized state.

Question

Function of cytochrome *c* : why four hemes ?

Methods

Homology modeling

The sequence of the RC polypeptides from *Rsb. denitrificans* are closely related to the sequences of RC's with known three-dimensional X-ray structures (see Table 1). Based on these structures and the high sequence identity a structural model of the RC from *Rsb. denitrificans* was calculated by means of comparative modeling using the software package MODELLER [3]. It contained four protein subunits, 13 cofactors and 47 conserved water molecules

Organism	Subunits					
	C	H	L	M	HLM	CHLM
Rh. sphaeroides	-	54	70	58	61	-
Tch. tepidum	24	39	69	57	55	47
Blc.viridis	29	37	62	49	49	44

Table 1: Sequence identities (%) of the different subunits of the reaction center from *Rsb. denitrificans* **with those of template proteins.**

FTIR difference spectroscopy

FTIR difference spectroscopy of isolated RCs (T = 7.0 ± 0.2 °C, pH = 7.0) was performed with a Bruker IFS 66 vfS. The light-minus-dark FTIR difference spectrum (light source: frequency doubled Nd: YAG, λ = 532 nm) of the charge separation between the primary donor P and the secondary quinone Q_B (referred to as $P^+Q_B^-/PQ_B$ FTIR difference spectrum) exclusively shows the absorbance changes resulting from the electron transfer from P^+ to Q_B^- and the response of the protein.

Continuum electrostatics

We computed heme midpoint potentials E_m from electrostatic energies solving the linearized Poisson-Boltzmann equation (LPBE). This method was applied in the past to simulate a wide variety of systems [4-6] obtaining very good agreement with experiments.

Heme action potentials

ET processes typically occur under non-equilibrium conditions. Hence, the heme charge states deviating from equilibrium may be relevant for an appropriate description of a particular ET process. ET relevant redox potentials whose values deviate from the equilibrium value E_m are denoted as "action potentials".

Electron transfer kinetics

Heme action potentials were translated into free energy differences which can be related with ET rates by applying a simple Marcus theory and using an appropriate value for the reorganization energy (0.7 eV) [7].

Results and Discussion

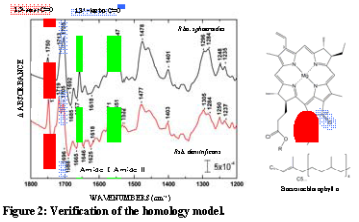


Figure 2: Verification of the homology model.

The light-induced $P^+Q_B^-/PQ_B$ FTIR difference spectrum of RCs from Rsb. denitrificans coincides with that of Rba. sphaeroides indicating that the interactions between the primary donor and the protein are very similar. Changes in the spectrum can be rationalized with mutations in the RC structure of Rsb.denitrificans.

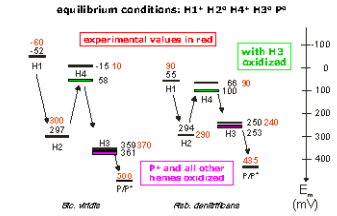


Figure 3: Heme coupling and action potentials for the four hemes in *Blc. viridis* **and** *Rsb. denitrificans*.

Using the model structure of the CytC from Rsb.denitrificans, the deviation between theory and experiment is slightly higher with ± 25 mV compared to previous results on Blc. viridis obtained by Voigt and Knapp [8]. We accomplished the assignment of the experimental values to the different hemes in the structure of Rsb. denitrificans.

The midpoint potential of a heme is affected by the redox state of the surrounding hemes and the primary donor.
Green: Action potential of H4 with H3 in its oxidized state
Magenta: Action potential of H3 with the primary donor and all other hemes in the oxidized state

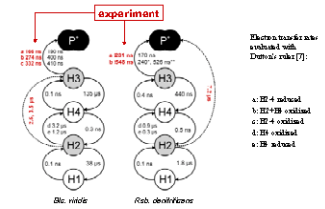


Figure 4: Electron transfer rates.

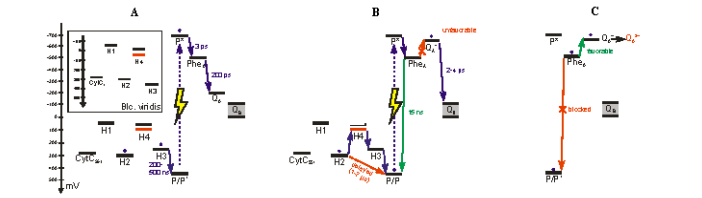


Figure 5: The "roller coaster" electron transfer chain

We hypothesize that the tetraheme CytC is a two-electron redox system under physiological conditions because 1) anoxygenic photosynthesis involves the transport of two electrons per photocycle and 2) the low redox potentials of H1 and H4 suggest them to be oxidised. The spatial arrangement of H1-H4 gives rise to an alternating order of high and low redox potentials along the ET chain.

A - In the dark adapted state, CytC holds two electrons and quickly replenishes the electron hole on the special pair after photooxidation.

B - Electron transfer from Q_A to Q_B requires several microseconds which may cause unproductive charge recombination between P and Phe_A at high light intensities (green arrow). The low potential heme H4 ensures that the second electron stored in CytC is hold back until Q_A is oxidized.

C - With the low potential heme H4 missing, the possibility of charge recombination between P and Phe_A would be blocked by the immediate delivery of the second electron from CytC. Double reduction of Q_A would then become likely and subsequent protonation of Q_A^{2-} would irreversibly inactivate the RC.

We conclude that the core issue of this "roller coaster" is the endergonic ET step between H2 and H3 which significantly delays ET of the second electron stored in CytC and which might therefore be involved in protection from photooxidative damage at high light intensities.

References

[1] Deisenhofer, J. et al. (1985) *Nature* 318, 618-623.
[2] Garcia, D. et al. (1994) *Biochemie* 76, 666 - 673
[3] Sali, A. and Blundell, T.L. (1993) *J. Mol. Biol.* 234, 779-815.
[4] Vagedes, P. et al. (2000) *J. Am. Chem. Soc.* 122, 12254-12262.
[5] Rabenstein, B. and Knapp, E.-W. (2001) *Biophys. J.* 80, 1141-1150
[6] Ishikita, H. and Knapp, E.-W. (2006) *PNAS* 103, 9855-9860.
[7] Page, C.C. et al. (1999) *Nature* 402, 47-52.
[8] Voigt, P. and Knapp, E.-W. (2003) *J. Biol. Chem.* 278, 51993-52001.

Determination of the 3D orientation of electronic transition dipole moments and conformations of molecules in solution by polarization resolved femtosecond VIS pump – IR probe spectroscopy

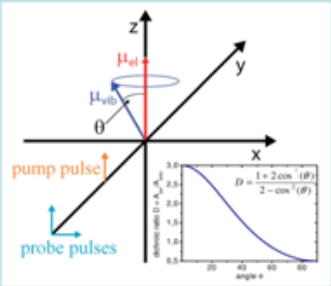
Freie Universität Berlin

Martin Linke[1], Moritz Theisen[1], Theodore von Haimberger[1], Alexandra Lauer [1], Henk Fidder[1], Madjet El-Amine[3], Max Kerbs[3], Angelica Zacarias[1,2], and Karsten Heyne[1]

1 Freie Universität Berlin, Department of Physics, Arnimallee 14, 14195 Berlin, Germany
2 European Theoretical Spectroscopy Facility (ETSF)
3 Freie Universität Berlin, Department of Chemistry, Takustrasse 6, 14195 Berlin, Germany

Polarization resolved measurements

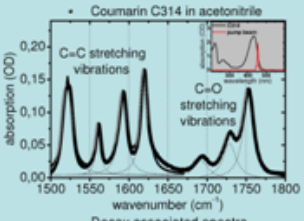
- Method to determine the angles between an electronic transition dipole moment (tdm) and vibrational tdm's.
- Calculation of the orientation of the electronic tdm vector.
- No prealigned samples needed (photoselection).

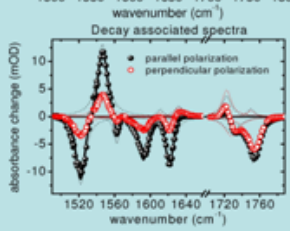


Coumarin 314

Motivation:

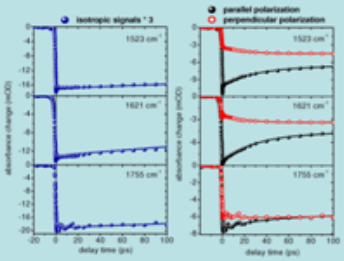
- Determination of the 3D orientation of the electronic tdm vector of Coumarin 314 in the molecular frame.
- Assignment of the molecular conformation of Coumarin 314 dissolved in acetonitrile.





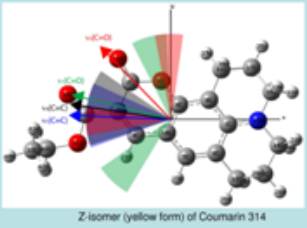
Parameters:

- Pumped at 455 nm
- Spectral width of pump pulses 6 nm, energy 5 µJ
- Probe pulses in the spectral region between 5 and 7 µm
- Typical probe pulse duration 160 fs, spectral width 100 cm⁻¹
- Repetition rate 1 kHz
- 2x32 element MCT array detector, spectral range 50 cm⁻¹, resolution 1.6 cm⁻¹
- Time resolution shorter than 400 fs

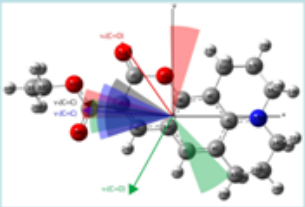


Results:

- The experimentally determined electronic tdm vector of the S_0->S_1 transition is (-0.99 | 0.1 | -0.02).
- The C314 we used appeared to be in the E-form in acetonitrile. The amount of Z-isomer was negligible.



Z-isomer (yellow form) of Coumarin 314



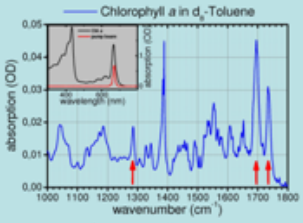
E-isomer (orange form) of Coumarin 314

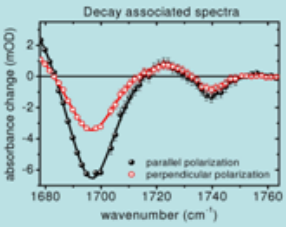
Chlorophyll *a*

Motivation:

- Chlorophyll plays an essential role in photosynthesis.
- The efficiency of energy transfer between chlorophyll molecules in photosynthetic systems depends critically on the distance and orientation of their Q_y tdm's.
- Knowledge of the exact orientation of the Q_y electronic tdm of Chlorophyll *a* within the molecular structure is an important input parameter for simulations on spectra and energy transfer of photosythetic systems.

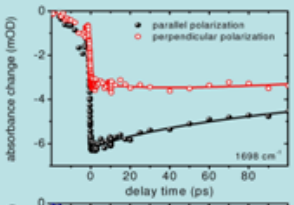
- Excitation is performed in the Q_y band.
- The C=C stretching vibration of the chlorin ring and two carbonyl stretching vibrations were probed in the IR fingerprint region.

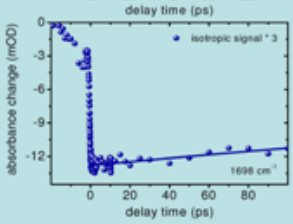


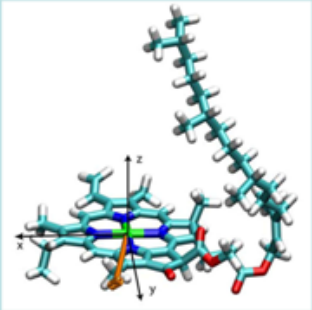


Parameters:

- Vis pump pulses at 665 nm
- Spectral width of pump pulses 14 nm, energy 1-2 µJ
- Mid-IR probe pulses in the spectral range of 1800 - 1150 cm⁻¹
- Typical probe pulse duration 160 fs, spectral width 100 cm⁻¹
- 2x32 element MCT array detector, resolution 1.6 cm⁻¹
- Time resolution about 300 fs
- 1-2 mM Chl *a* solution in d_8-toluene







Results:

- The full 3D Q_y electronic tdm was determined.
- Angles with the Cartesian axes linked to the x-y plane through the chlorin ring are (78 ± 3)° with the x-axis, (12 ± 3)° with the y-axis, and (86 ± 2)° with the z-axis.

CRYSTAL STRUCTURE OF OPSIN IN ITS G-Protein-Interacting Conformation

Patrick Scheerer[1,§,*], Jung Hee Park[1,§,*], Peter Werner Hildebrand[1], Yong Ju Kim[1], Norbert Krauß[2], Hui-Woog Choe[1,3], Klaus Peter Hofmann[1] and Oliver Peter Ernst[1]

[1]Charité - Universitätsmedizin Berlin, Institut für Medizinische Physik und Biophysik, Ziegelstr. 5-9, D-10117 Berlin, Germany
[2]Queen Mary, University of London, School of Biological and Chemical Sciences, London E1 4NS, United Kingdom
[3]Department of Chemistry, College of Natural Science, Chonbuk National University, 561-756 Chonju, S. Korea
[§]email: patrick.scheerer@charite.de & jung-hee.park@charite.de
*These authors contributed equally to this work

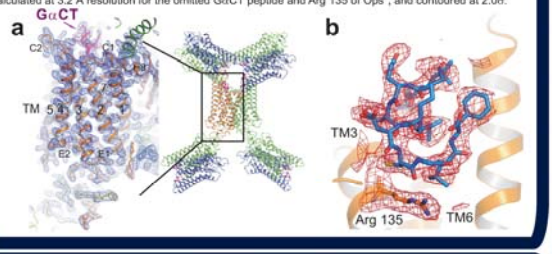
CHARITÉ UNIVERSITÄTSMEDIZIN BERLIN

Introduction

G-protein-coupled receptors (GPCRs) are the largest superfamily of plasma membrane receptors [1]. Binding of extracellular ligands to GPCRs modulates their capacity to catalyse GDP–GTP exchange in heterotrimeric G proteins (Gαβγ), thereby regulating the intracellular level of secondary messengers. Opsin, the ligand-free form of the G-protein-coupled receptor rhodopsin, at low pH adopts a conformationally distinct, active G-protein-binding state known as Ops* [2,3]. A synthetic peptide derived from the main binding site of the heterotrimeric G protein — the C terminus of the α-subunit (GαCT) —stabilizes Ops*. Here we present the 3.2 Å crystal structure of the bovine Ops*–GαCT peptide complex [4]. GαCT binds to a site in opsin that is opened by an outward tilt of transmembrane helix (TM) 6, a pairing of TM5 and TM6, and a restructured TM7–helix 8 kink.

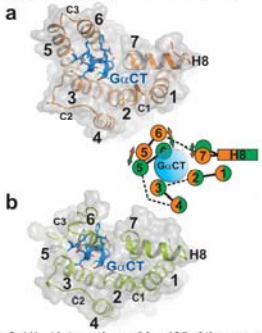
Experimental methods

Crystallization of Ops*–GαCT peptide complex containing 3.2 M ammonium sulphate in 0.1 M MES or sodium citrate buffer (pH 6.0) as precipitating agents was only successful. The Ops*–GαCT crystals belong to rhombohedral space group H32 (a = 238.02 Å , b = 238.02 Å, c = 109.13 Å, $\alpha = \beta = 90°, \gamma = 120°$). Data collection, molecular replacement (with PDB entry: 3CAP) and crystallographic refinement was finally carried out using a data set (beamline BL 14.2 at BESSY(Berlin, Germany)) at 3.2 Å resolution, yielding final agreement factors R_{work} = 21.3% and R_{free} = 24.8%. **a**, 2*Fo – Fc* electron density map (blue) contoured at 1.2σ of the Ops*–GαCT complex and crystal packing. **b**, *Fo – Fc* simulated annealing σ_A-weighted omit map (red), calculated at 3.2 Å resolution for the omitted GαCT peptide and Arg 135 of Ops*, and contoured at 2.0σ.



Results

Figure 2a/b: | Comparison of Ops*–GαCT [4] and dark-state rhodopsin [5,6] structures. a, View from the cytoplasm of Ops*–GαCT. Ops* is shown in ribbon/surface representation (orange/grey) and the GαCT peptide ($G\alpha_t$(340–350)K341L; **ILENLKDCGLF**) as a ribbon/stick model (blue). **b**, View from the cytoplasm of rhodopsin (PDB:1U19 (green/grey)) and superposed GαCT (blue). The scheme indicates differences in the arrangement of TM1–TM7 between Ops*–GαCT (Ops*, orange; GαCT, blue) and rhodopsin (green).



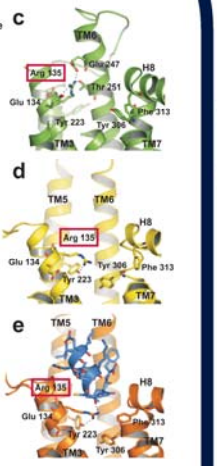


Figure 2c/d/e: | Interactions of Arg 135 of the conserved E(D)RY motif.
c, In dark-state rhodopsin (PDB entry: 1U19), Arg 135 of the conserved E(D)RY motif interacts with Glu 134 and links TM3 with TM6 by Glu 247 and Thr 251. The TM7–H8 kink is stabilized by electrostatic interaction between Tyr 306 and Phe 313. **d**, In opsin (PDB entry: 3CAP), Tyr 223 (TM5) interacts with Arg 135,which is released from Glu 134. Tyr 306 is rotated to face into the helical bundle. **e**, In Ops*–GαCT (PDB entry: 3DQB; Ops*, orange; GαCT, blue), Arg 135 and Tyr 223 interact with the main-chain carbonyl of GαCT residue Cys 347. In addition to the rotated Tyr 306 side chain, Phe 313 shows a different rotamer conformation.

Prominent features in Ops*–GαCT complex structure

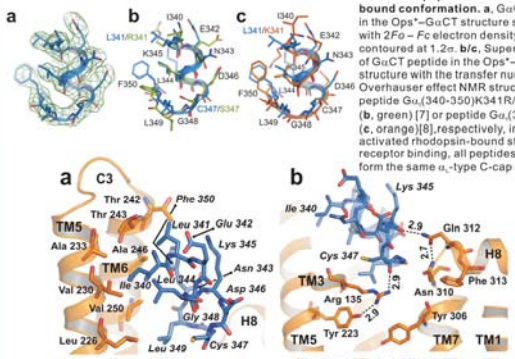


Figure 3a/b/c | Gαt-derived C-terminal peptides in the receptor bound conformation. a, GαCT peptide in the Ops*–GαCT structure shown with 2*Fo – Fc* electron density map contoured at 1.2σ. **b/c**, Superposition of GαCT peptide in the Ops*–GαCT structure with the transfer nuclear Overhauser effect NMR structure of peptide $G\alpha_t$(340-350)K341R/C347S (**b**, green) [7] or peptide $G\alpha_t$(340-350) (**c**, orange)[8],respectively, in the light-activated rhodopsin-bound state. Upon receptor binding, all peptides fold up to form the same α_L-type C-cap motif.

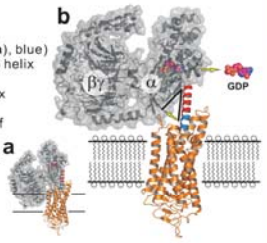
Figure 4a/b/c/d | Stabilizing effects of GαCT on Ops*. a, Pairing of the cytoplasmic parts of TM5 and TM6 in Ops* exposes hydrophobic side chains for van der Waals interaction with GαCT, which adopts a near-ideal α-helix terminated by an α_L-type C-cap. **b**, The hydrogen-bonded network linking GαCT peptide with the two conserved E(D)RY (Arg 135) and NPxxY(x)$_{5-6}$F (Gln 312/Asn 310) regions of Ops*. **c**, Long-range effects of GαCT binding lead to stabilization of the Lys 296 side chain in a potential network of weak interactions comprising Lys 296 in TM7, Ser 186 and Glu 181 in loop E2, and Tyr 268 in TM6. A direct stabilizing effect on Lys 296 by Glu 113 is negligible owing to a large distance. **d**, The view of the retinal binding pocket from the extracellular side is shown. 11-*cis*-retinal was superimposed from rhodopsin (PDB entry: 1U19) to illustrate the empty retinal binding site. The side chains of Tyr 268 and Trp 265 moved into the space filled by retinal in rhodopsin.

Conclusions

- Opsin adopts an active (ops*) conformation (compare with Ref. [2])
- Movement of transmembrane helix 6 is necessary for GαCT binding
- Subtle but distinct structural changes occur in the receptor upon GαCT binding
- X-ray crystallography and NMR yield almost identical conformations of the receptor-bound GαCT peptide
- GαCT binding induces long-range stabilization effects into the ligand binding site

Conceptual model

1) The Ops*-bound GαCT peptide (left figure (**a**), blue) can be elongated (red) to reconstruct the α5 helix of the Gα-subunit
2) Complementing of the reconstructed α5 helix with the remainder of the G protein (PDB entry: 1GOT) would result in a clash of Gαβγ with the lipid bilayer (left figure(**a**))
3) To avoid such a clash, the α5 helix and the remainder of the G protein are tilted by ≈40° relative to each other (right figure (**b**))
4) For GDP release, a tilt of the rigid α5 helix relative to the G protein upon receptor binding was previously proposed from EPR experiments [9,10]



References

[1] Pierce KL, Premont RT & Lefkowitz RJ (2002) *Nature Rev Mol Cell Biol* **3**, 639–650. **[2]** Park JH, Scheerer P, Hofmann KP, Choe H-W & Ernst OP (2008) *Nature*, **454**, 183-187. **[3]** Vogel R & Siebert F (2001) *J Biol Chem* **276**, 38487-38493. **[4]** Scheerer P, Park JH, Hildebrand PW, Kim YJ, Krauß N, Choe H-W, Hofmann KP & Ernst OP (2008) *Nature*, **455**, 497-502. **[5]** Palczewski K, et al. (2000) *Science* **289**, 739-745. **[6]** Okada T, Sugihara M, Bondar AN, Elstner M, Entel P, & Buss V (2004) *J Mol Biol* **342**, 571-583. **[7]** Koenig BW, et al. (2002) *J Mol Biol* **322**, 441-461. **[8]** Kisselev OG, et al. (1998) *Proc Natl Acad Sci USA* **95**, 4270-4275. **[9]** Oldham WM, Van Eps N, Preininger A M, Hubbell W L & Hamm HE (2006) *Nature Struct Mol Biol* **13**, 772–777. **[10]** Oldham WM & Hamm HE (2008) *Nature Rev Mol Cell Biol* **9**, 60-71.

Von Willebrand Factor (vWF) membrane interaction

Biological Physics Group - Augsburg

Biological Physics Group

J. I. Angerer[1,3], D. M. Steppich[1], A. J. Reininger[3], S. W. Schneider[2], A. Wixforth[1], M. F. Schneider[1]

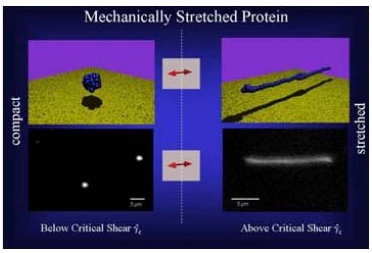
[1]Experimentalphysics I, University of Augsburg, Universitätsstr.1, 86159 Augsburg, Germany
[2]Department of Dermatology, University of Münster, Von-Esmarch-Strasse 58, 48149 Münster, Germany
[3]Department of Transfusion Medicine/Hemostaseology, Ludwig-Maximilians-University Munich, Max-Lebsche-Pl. 32, 81377 Munich, Germany

Abstract:
To elucidate the vWF membrane adhesion process we prepared artificial phospholipid membranes to investigate the generic interactions (electrostatic, hydrophobic) of vWF and specific membranes by means of AFM Force Spectroscopy, Differential Scanning Calometry (DSC) and Fluorescence Microscopy.

Motivation

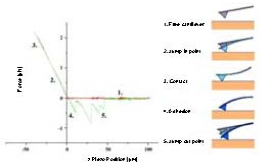
- Von-Willebrand-Factor (vWF) is the crucial protein for the initial step of blood coagulation
- Its conformation is strongly related to the shear flow mediated by the surrounding medium
- Only the unrolled form is physiologically/ haemostatically active
- The bound vWF is responsible for the fixation of platelets out of the blood stream and therefore finally for wound healing.

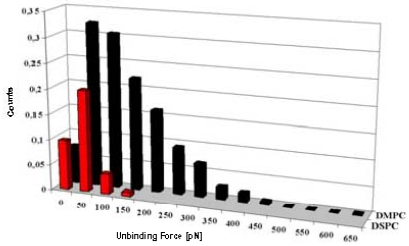
The actual binding behaviour of the vWF molecule to the endothelial cell wall is still NOT understood.



AFM Force Spectroscopy

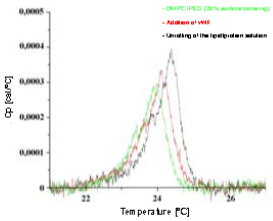
vWF Molecules are chemically bound to the AFM tip to measure the interaction forces of certain surfaces





- Enhanced number of binding events and unbinding forces of vWF with a fluid (DMPC) rather than with a gel (DSPC) like membrane
- No charge dependence
- Amount of binding sites increased dramatically when unrolling the tip bound vWF

Differential Scanning Calometry



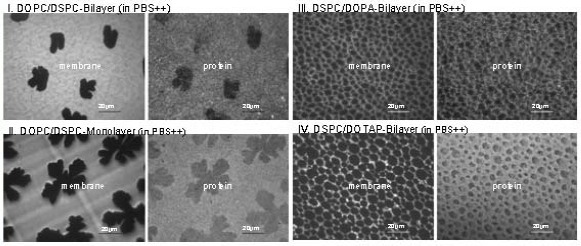
Impurities added to small unilamellar vesicles (SUVs) shift the phase transition of the membrane proportional to the amount of impurities. Protein binding to the membrane has the same effect. Roughly spoken this means: The more protein adhesion to the membrane the bigger the shift of the phase transition temperature.

Melting Point Transition $\Delta T = \frac{RT_m^2}{\Delta H} \cdot x$

- Conformational dependent adhesion of vWF to phospolipid membranes
- High tendency for protein self agglomeration for higher protein concentration

Adhesion under Shear Flow

vWF bound to membranes by means of a specifically modified immunostaining method. The membranes are labelled with T-Red (rhodamin) and vWF with NBD (fitc) respectively. This enables us to display the localisation of the protein on the membrane domain structure (picture below).



The images I.-IV. show the membrane on the left and the vWF molecules on the right side, respectively. To elucidate the role of the binding process we used neutral (DSPC, DOPC), positively (DOTAP) and negatively (DOPA) charged phospholipids for membrane preparation. The bright phase corresponds to the fluid part of the membrane (DOPC, DOTAP, DOPA). The bright phase of the related protein images is associated to vWF.

- preferred adhesion to fluid phase independent of charge

Conclusion

- **Electrostatic interaction** play a **minor role compared to hydrophobic forces**
- **vWF favours** to bind either to **the fluid phase** or to **the phase boundaries**, but not to the gel phase
- **Adhesion depends on the conformation**

References

[1] Schneider et al, BBRC 369 (2), 507-512 (2008)
[2] Schneider et al, PNAS 104 (19), 7899-7903 (2007)
[3] Katz et al, PRD 97 (13), 138101 (2006)

Acknowledgement

We would like to thank Prof. A. Wixforth for his scientific advise and fruitful discussions and A. Hupfer for his technical support. This work was supported in part by the German government through the Cluster of Excellence „NIM". D. M. Steppich likes to thank the Elitenetzwerk Bayern for funding this work. We also would like to thank the DFG.

Tension Dependent Energy Barriers for Vesicle Fusion

A. Grafmüller, and R. Lipowsky, Max Planck Institute of Colloids and Interfaces, 14424 Potsdam, Germany

Fusion of bilayer membranes plays an essential role in many processes in the cell. A large number of fusion attempts for a vesicle to a planar bilayer have been simulated with Dissipative Particle Dynamics (DPD) . The timescale of fusion depends on the membrane tension. Two tension dependent energy barriers can be identified on the fusion pathway: the flipflops of lipid from the vesicle to the planar bilayer and the reordering to a hemifused patch. We introduce single lipid force spectroscopy simulations to measure the energy barrier for the flipping process and thus determine the energy scale of membrane fusion.

Dissipative Particle Dynamics - (DPD)

Coarse Graining:

1) Soft Potential
2) Thermostated by the combination of random and dissipative Force

Control Parameter: Membrane Tension !

Forces:

$$F^C = a\left(1 - r/r_c\right)\hat{r}_{ij} \quad (r_{ij} \le r_c;\ \text{elsewhere } 0)$$

$$F^D = \sigma \cdot w^D(r_{ij})\hat{r}_{ij}$$

$$F^R = -\gamma \cdot w^R(r_{ij})(\hat{r}_{ij} \cdot v_{ij})\hat{r}_{ij}$$

Fluctuation-Dissipation Theorem:

$$\sigma^2 = 2\,k_B T\,\gamma$$

$$w^D = [w^R]^2$$

Total Force:

$$f_i = \sum_{j \ne i} F^C_{ij} + F^R_{ij} + F^D_{ij}$$

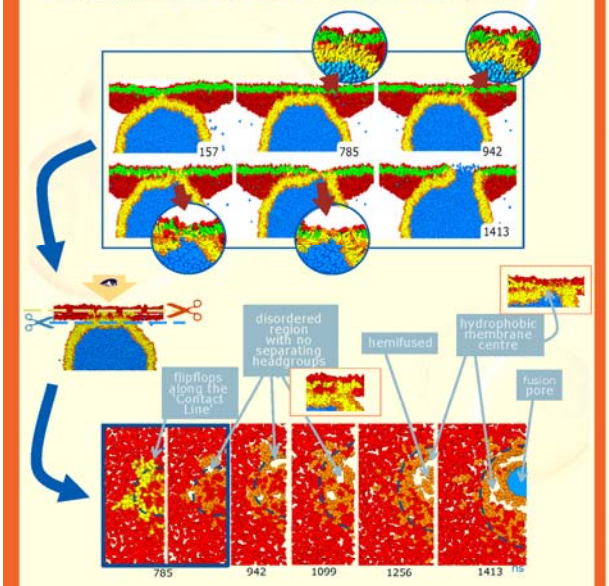
- Pairwise
- Equal + Opposite
- Total momentum conserved

$$U_s = \frac{1}{2}k_s(r_{ij} - l_0)^2$$

$$U_a = k_a\left[1 - \cos(\theta - \theta_0)\right]$$

The Fusion Pathway

The simulated fusion pathway for all successful fusion events goes through the same sequence of steps. Individual events differ mainly in the duration of each sub process.



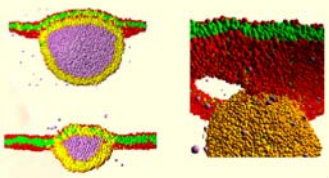
Not all fusion attempts are successful. Alternative final states are:

Low Tension: Adhesion or Hemifusion in mechanical equilibrium

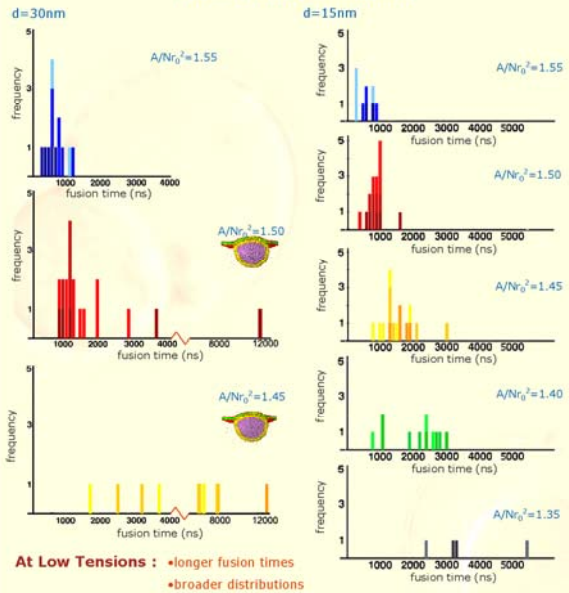
High Tension: Bilayer Rupture

Nonetheless: at intermediate tensions, success rates are close to 100%

tension has proved a simple but effective method to induce fusion

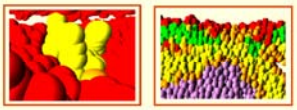


Fusion Time Distributions



At Low Tensions : •longer fusion times •broader distributions

Each successful fusion event has a corresponding fusion time, t_{fu}, defined as the time from first contact to formation of the fusion pore. The histograms show the distributions of , t_{fu}, for two vesicle sizes. The different distributions correspond to different tensions in the planar membrane. At lower tensions, the distribution become wider and shift to longer fusion times. Very long fusion times correspond to vesicles in mechanically stable adhesion. These distributions are cut off by the time limit of 20 µs

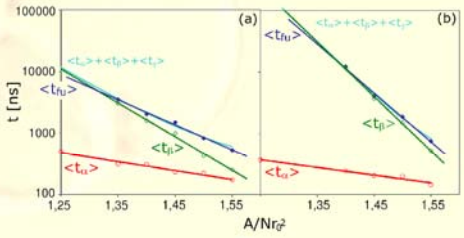


This implies a tension dependent Energy barrier for the fusion process. Two stages in the fusion process that are likely to constitute energy barriers are interbilayer flips and hemifusion. These steps require strong interaction between hydrophobic and hydrophilic material.

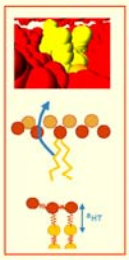
Three sub-processes can be defined:
α – the flipping sub-process;
β – the flipping sub-process;
γ – the rupture sub-process.

Each fusion time distribution is characterized by a mean and a widh given by the standard deviation. Both the average fusion time and the width of the time distribution grow exponentially as the tension is reduced, i.e. with increasing A_0.

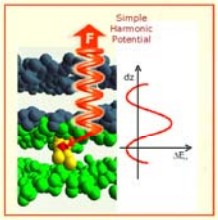
The averages of the total fusion time (blue), the average flipping time, i.e. the time until the first interbilayer flip has occurred (red) and the average reordering time, the time from the first flip until the formation of a hemifused patch (green) are plotted as a function of A_0 . The times for the two sub-processes grow exponentially with decreasing tension. At low tensions the fusion time is dominated by the formation of the hemifused patch. The timescale of the third sub-process, the rupture of the hemifused patch, does not depend on the membrane tension.



The Flipflop Barrier - Force spectroscopy Simulations



The Energy required to flip one lipid tail from the vesicle into the bilayer membrane can be measured directly:



To flip from the vesicle to the bilayer the hydrophobic tail chains have to overcome the layer of hydrated headgroups between the two membranes. The energy required for this should decrease with A/N and depend on a_{HT}.

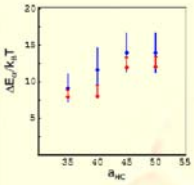
In two adhering bilayers, a lipid is chosen and one of its tails slowly pulled into the other bilayer with a harmonic potential.

During this process, the force on the bead is measured and plotted against the bead's displacement. Integration of the force yields the expended work:

$9\ k_BT$

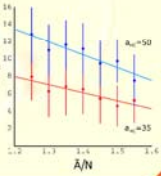
From the Yarzynski relation the corresponding energy barrier is estimated as:

$8\ k_BT$



The flipping energy depends on the a_{HT} parameter. Thus we have identified one simulation parameter which can be used to tune this energy barrier.

The flipping times suggest that the flipping barrier decreases linearly with tension. This tension dependence membrane tension can be reproduced with Force spectroscopy simulations.



Energy Barriers for Fusion

The scale of decay times is callibrated with the energy barrier for flipflops: $8\ k_BT$

The main energy barriers are $11\ k_BT$ and $14.5\ k_BT$ for 15 nm and 30 nm vesicles

Role of van der Waals interactions for the intrinsic stability of polyalanine helices

Alexandre Tkatchenko[1], Volker Blum[1], Joel Ireta[2] and Matthias Scheffler[1]

[1]Theory Department, Fritz-Haber-Institut der MPG, Berlin, Germany

[2]Dep. de Qumica, CBI, Universidad Autonoma Metropolitana-Iztapalapa, Mexico

tkatchen@fhi-berlin.mpg.de

THE PROBLEM

Peptide secondary structure energetics: Simulation methods

- FORCE FIELDS: Used successfully for decades for simulation of secondary structure formation, but there is no systematic way to improve the force field accuracy.
- AB INITIO QUANTUM MECHANICS: In principle, we should start with explicitly correlated *ab initio* electronic structure methods. However, this is too computationally expensive even for rather small systems (100 atoms).
- DENSITY FUNCTIONAL THEORY: Calculations are feasible for systems up to 1000's of atoms, but the description of van der Waals interactions is lousy.
- POSSIBLE SOLUTION: DFT+vdW ! But how good is it ?

van der Waals (dispersion) forces

- Attractive van der Waals forces are ubiquitous, crucial for stability of molecular crystals, proteins or physisorption. They arise due to interaction between fluctuating dipoles (multipoles).

Gecko, *wikipedia.org*

Polypeptide helix

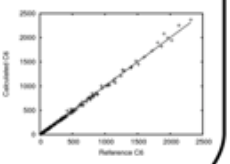
- State-of-the-art DFT functionals and Hartree-Fock theory fail for description of van der Waals attraction
- Post-Hartree-Fock methods can be employed for *ab initio* description of vdW interactions. Force fields include empirical vdW terms (Lennard-Jones).

Accurate C_6 coefficients for DFT+vdW

For two non-overlapping spherical atoms:

$$E = -\left(\frac{C_6}{R^6} + \frac{C_8}{R^8} + \frac{C_{10}}{R^{10}} + \ldots\right)$$

- We developed a scheme to obtain molecular C_6 coefficients using only DFT ground-state density and accurate free-atom C_6 coefficients. The method is accurate to better than 6% to a large database of experimental DOSD results.



DFT+VAN DER WAALS SCHEME

Damped C_6R^{-6} correction scheme*

Dispersion energy decaying as $C_6 R^{-6}$ is directly added to the DFT total energy, damped at short distances,

$$E_{disp} = -S_6 \sum_{ij} f_{damp}(r_{ij}, R_{ij}^0) C_{6ij} r_{ij}^{-6}$$

$$f_{damp} = \frac{1}{1 + \exp(-d(r_{ij}/(S_R R_{ij}^0) - 1))}$$

- Gradients are straightforward to implement
- The density is affected only due to changes in geometry
- Three parameters to be determined by a fit to post-HF data
- The fit is insensitive to the value of *d*. *d=20* in what follows.

* *Hepburn&Scoles* ***CPL*** (1975); *Elstner et al.* ***JCP*** (2001); *Wu, Yang* ***JCP*** (2002); *Grimme* ***J. Comp. Chem.*** (2004,2006); *Ortmann, Bechstedt, Schmidt* ***PRB*** (2006); *Jurecka, Cerny, Hobza, Salahub* ***J. Comp. Chem.*** (2007); and others ...

Fitting to molecular database

- Fitting to ***S22*** database of Jurecka *et al.**
- 22 weakly-bonded systems, from pure dispersion (benzene dimer) to hydrogen bonding (water dimer)
- 20 meV – 0.8 eV binding energy span

$$E_{disp} = -S_6 \sum_{ij} f_{damp}(r_{ij}, R_{ij}^0) C_{6ij} r_{ij}^{-6}$$

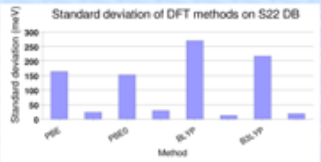
$$f_{damp} = \frac{1}{1 + \exp(-d(r_{ij}/(S_R R_{ij}^0) - 1))}$$

Jurecka, Sponer, Cerny and Hobza,* ***PCCP* *(2006)*

Method	S_R	S_6	Std.Dev. (meV)	Ave % Error
HF	0.96	1.26	43	13.8%
PBE	1.00	1.00	24	11.1%
revPBE	0.76	1.24	25	9.6%
PBE0	1.04	1.00	30	9.5%
BLYP	0.87	1.33	13	4.3%
B3LYP	0.94	1.19	19	6.8%

- Hartree-Fock method is the worst, no short-range vdW
- revPBE, BLYP and B3LYP give lower errors, but require unphysical parameter values
- PBE and PBE0 are the most physically motivated functionals for the dispersion correction

Corrected vs. uncorrected functionals



- The *C6* correction reduces the error 6-fold for PBE
- Short-range van der Waals interaction is better described by PBE and PBE0

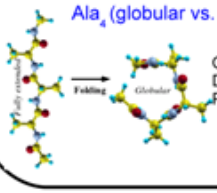
POLY-ALANINE ENERGETICS

Small alanine peptides

Ala_2

	CBS-MP2	PBE	PBE+C_6	BLYP	BLYP+C_6
$C7_{eq}$	0	0	0	0	0
C5	61	52	60	41	74
$C7_{ax}$	117	110	96	101	85
β_2	147	121	125	116	134
α_L	225	NOT	236	NOT	NOT
α	295	297	300	277	272

Ala_4 (globular vs. fully extended)



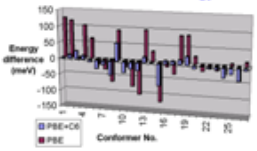
CBS-MP2: 216 meV
DFT-PBE: 2 meV
PBE+C6: 220 meV

Alanine tetrapeptide (27 conformers)

DFT-MP2 Error in meV

	Mean. abs error	Max error
PBE	54	123
PBE+C_6	20	67
BLYP	77	185
BLYP+C_6	35	113
PBE0	52	151
PBE0+C_6	23	50

DFT-MP2 energy



Only 5 meV error per residue with PBE+C_6 and PBE0+C_6

MP2: *Distacio Jr., Jung and Head-Gordon* ***JCTC*** *(2005)*

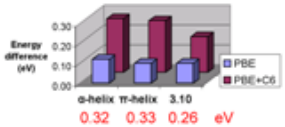
Extended (infinite) helices

The infinite model for a helix allows to avoid the need for capping and study the *intrinsic* stability

J. Ireta, J. Neugebauer, M. Scheffler, A. Rojo, M. Galvan, ***JACS*** *(2005),* ***JPCB*** *(2003).*

How stable are infinite (poly)-Alanine helices *in vacuo* ?

HELIX-FES stability (per residue)



0.32 0.33 0.26 eV

C6 vdW contributions

CONCLUSIONS

1) Van der Waals interactions are crucial for the helix stability; the relative stability increases by 221% for the α-helix, 257% for the π-helix and 183% for the 3_{10} helix in respect to the fully extended structure.

2) In agreement with recent *in vacuo* experiments (R.A. Hudgins, M.A. Ratner and M.F. Jarrold, ***JACS*** (1998)) and force field simulations, the α-helix is the most stable. The π-helix is close in stability, but it becomes unstable at finite temperature due to the loss of vibrational entropy (L. Ismer, J. Ireta and J. Neugebauer, ***JPCB*** (2008)).

3) The additional energetic gain due to van der Waals interactions gives a clue to the exceptional stability of polyalanine helices *in vacuo* up to 750 Kelvin (M. Kohtani *et al.*, ***JACS*** (2004)).

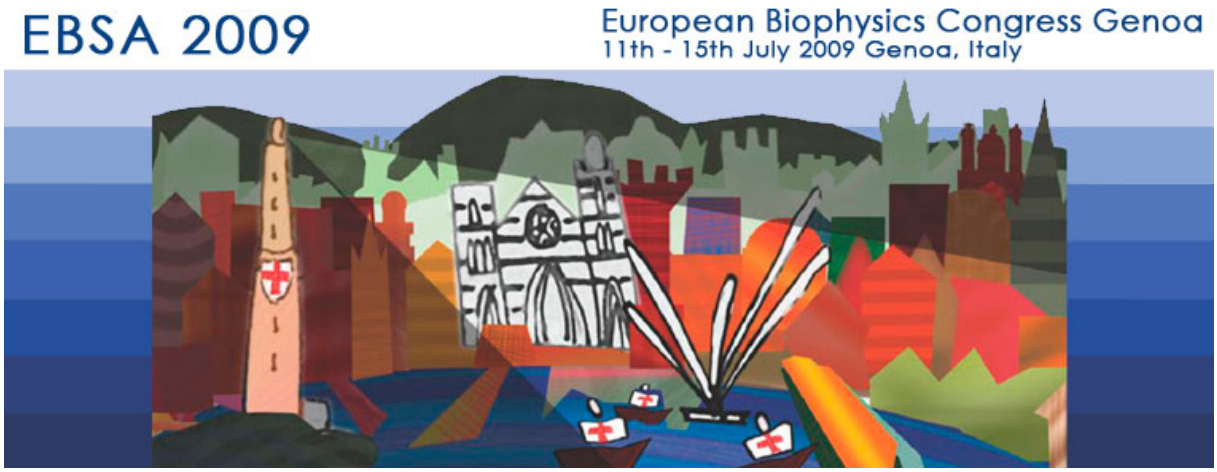
5. Tagungshinweise

- Workshop "Neutrons and X-rays meet biology"
25-27 February, 2009, Helmholtz Zentrum Berlin für Materialien und Energie
http://www.helmholtz-berlin.de/events/biology/

- Sektionstagung der Sektion Molekulare Biophysik
21.-23. Mai 2009, Bonifatius Kloster Hünfeld

- European Biophysics Congress 2009, Genoa

www.ebsa2009.org



Deadline for online advance registration **April 7th 2009**

Es wird wieder Reisestipendien für jüngere Wissenschaftler geben. Bitte Bewerbungen an den Sekretär der DGfB.

6. Mitglieder

Antrag auf Mitgliedschaft 2008

In der print-version zugänglich