Anfang Oktober wurden die drei naturwissenschaftlichen Nobelpreise vergeben

Viel Chemie in Stockholm

Martin Karplus, Michael Levitt und Arieh Warshel aus den USA erhalten den diesjährigen Nobelpreis für Chemie. Die Forscher werden für ihre Pionierleistung auf dem Gebiet mehrskaliger Computermodelle zur Simulation komplexer chemischer Prozesse geehrt. Neben den Chemikern erhalten drei Biochemiker den Nobelpreis für Medizin/Physiologie, der diesmal für bahnbrechende Forschungen zur Entschlüsselung des Zelltransports vergeben wird. Der Nobelpreis für Physik geht an jene Wissenschaftler, welche das Higgs-Boson vorausgesagt haben – das Urteilchen, das 2012 im CERN nachgewiesen wurde.



Michael Levitt (Mitte) von der Stanford University School of Medicine in Kalifornien und sein Kollege, der Chemie-Nobelpreisträger von 2006, Roger Kornberg (links) feiern im Departement Levitts Nobelpreis.

Sabine Goldhahn

Chemie ist weit mehr, als wenn es kracht und stinkt. Ganz ohne Rauch und Beissen in der Nase kann man heute den Molekülen bei ihren Reaktionen zusehen und staunen, wie Bindungen aufbrechen und sich komplizierte Strukturen binnen Bruchteilen von Millisekunden neu formen. Man sitzt einfach am Computer und wird nur noch durch die Rechenleistung der Maschine begrenzt. Das war noch vor ein paar Jahrzehnten völlig unmöglich, denn damals

konnte man Modelle in der Chemie vor allem per Hand zusammenbauen – mit weissen und bunten Kugeln, die aneinander oder auf Verbindungsstäbe gesteckt wurden. Der nächste Schritt waren dann Moleküle am Computer, die man drehen und wenden konnte. So bekam man zwar eine räumliche Vorstellung davon, wie ein Molekül aussieht und wie die einzelnen Atome angeordnet sind, wusste jedoch noch lange nichts über Anziehungskräfte oder etwa elektrische Potenziale und Wellenlängen und war damit vor allem in der

Simulation der möglichen chemischen Reaktionen begrenzt.

Die Verbindung zweier Welten

Chemie von heute beginnt fast immer am Computer, zumindest wenn es um grosse Synthesen oder beispielsweise die Wirkungsweise von Katalysatoren geht. Computermodelle sind für Chemiker unverzichtbar, denn durch die Simulation von chemischen Reaktionen muss man nicht mehr alle Verbindungen herstellen und spart Zeit und Ressourcen. Der diesjährige Nobelpreis für Chemie wird an jene drei Chemiker verliehen, die solche Simulationen erst möglich gemacht und das Experiment in den Cyberspace gebracht haben. Die Königlich-Schwedische Akademie begründete die Vergabe damit, dass es den Forschern gelungen ist, die zwei Welten der klassischen Newton'schen Physik und der Quantenphysik zu verbinden. Das heisst, dass die Moleküle nicht mehr nur nach ihrer Grösse. Masse und Position der einzelnen Atome zueinander betrachtet werden. sondern dass bei der Berechnung einer chemischen Reaktion jedes einzelne Elektron und jeder Atomkern, deren Wechselwirkungen und energetische Zustände berücksichtigt werden. Erst damit kann man ihren jeweiligen Einfluss und die Auswirkungen auf ihre Reaktionsfähigkeit vorhersagen und umfangreiche chemische Reaktionen simulieren.

Gemeinsam das Ziel erreicht

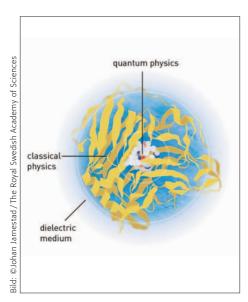
Der erste Schritt zu diesem «Handschlag» wurde bereits Anfang der 70er-Jahre ge-

4 11/2013



Arieh Warshel von der University of Southern California in Los Angeles

macht. Der 1930 in Wien geborene Martin Karplus von der französischen Université de Strasbourg und der amerikanischen Harvard University in Cambridge entwickelte mit seiner Arbeitsgruppe Programme, die Formeln und Konstanten der Quantenphysik nutzten, um chemische Reaktionen zu berechnen. Zur Arbeitsgruppe von Karplus stiess Arieh Warshel. Warshel, der in einem Kibbuz in Israel zur Welt gekommen ist, hatte mit dem Südafrikaner Michael Levitt bereits an dem Hochleistungs-Computer



Wenn Wissenschaftler heute molekulare Prozesse studieren wollen, arbeiten sie fast immer mit Computersimulationen. Die berücksichtigen die drei Bereiche Quantenphysik, klassische Physik und seit kurzem auch das dielektrische Medium und erlauben damit Berechnungen grosser chemischer Prozesse.



Am Tag der Bekanntgabe des Nobelpreises in Medizin / Physiologie steht das Telefon von Randy Schekman von der University of California in Berkeley nicht mehr still.

Golem des israelischen Weizman-Instituts gearbeitet und dort ein Programm geschrieben, das noch auf der klassischen Theorie beruhte und bereits die Struktur von relativ grossen Molekülen berechnete. Karplus und Warshel führten schliesslich an der Harvard University erstmals beide Systeme zusammen und publizierten 1972 ihre Ergebnisse. Kurze Zeit später setzte Warshel die Zusammenarbeit mit Levitt wieder fort.

Die Forscher konzentrierten sich auf die Entwicklung eines Programmes, mit dem man enzymatische Reaktionen studieren kann. 1976 schliesslich erreichten sie ihr Ziel und publizierten das erste Computermodell einer enzymatischen Reaktion. Nachfolgend verbesserten sie ihr Computermodell derart, dass nicht mehr jedes einzelne Atom in chemisch weniger wichtigen Regionen eines Moleküls berücksichtigt werden musste. Dennoch dauerte es noch weitere Jahre, bis es möglich wurde, enzymatische Reaktionen als ganzen Prozess zu simulieren.

Das Besondere an der von Karplus, Warshel und Levitt entwickelten Methode liegt nicht nur in der Kombination zweier Welten, sondern auch in ihrer Universalität. Man kann sie inzwischen mittels grosser Simulationsprogramme in allen Gebieten der Chemie anwenden.

sterico

шшш.sterico.ch info@sterico.ch

VARIOKLAY*

DAMPFSTERILISATOREN

VON 25 - 200 LITER

Stand- und Tischgeräte
mit integriertem Doppelmantel
Schnellkühlen von Flüssigkeiten,
Vor- und Nachvakuum
Abluftfiltration mit
Kondensatsterilisation



Mikrobiologisches Labor,
Infektiöse Labor- und Klinikabfälle
Gentechnisch veränderte Stoffe
Steril-, Pharma- und
Medizinprodukte
Instrumentenaufbereitung
im Krankenhaus

VARIOKLAY*

Laborautoklaven

terico

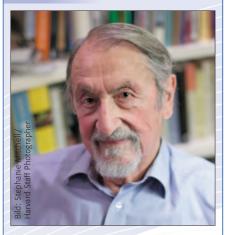
sterico AG

Ruchstuckstrasse 14 8306 Brüttisellen Schweiz

+41 (0) 43 255 99 09 +41 (0) 43 255 99 08

www.sterico.ch

XTRA



Martin Karplus, einer der diesjährigen Nobelpreisträger, hat neben der Chemie noch eine andere Passion: Er liebt Fotografie und hält die Welt seit seiner Jugend mit der Kamera fest. Einige seiner Bilder hingen bereits in Ausstellungen, und eine Auswahl kann man sogar im Internet bewundern. Für seine Fotografien hat er eine ganz eigene, fast melancholische Motivation:

«They preserve my vision of a world, much of which no longer exists. Economic development, universal communication, and war have taken a heavy toll: Many of the towns and villages have been destroyed or replaced, everyday costumes of the time are at best worn at events for tourists, and much of the social fabric of the communities has been destroyed. Many of the people I photographed belonged to the last generation to live in a way that had existed for centuries. Each area I visited in Europe and America had its own traditions that have now disappeared as the world has been homogenized.»

Martin Karplus auf seiner Fotografie-Webseite www.mkarplusphotographer.com





Thomas Südhof von der Stanford University

Forschung zum Vesikeltransport geehrt

Bedeutend – nicht nur auf dem Gebiet der Medizin – sind die Arbeiten der drei Biochemiker Randy Schekman, James Rothman und Thomas Südhof, für die sie am 10. Dezember den Nobelpreis für Medizin/ Physiologie überreicht bekommen werden. Schekman arbeitet an der University of California in Berkeley und dem Howard Hughes Medical Institute, Rothman an der Yale University in New Haven, und der gebürtige Deutsche Südhof, der seit 1983 in den USA lebt, an der Stanford University. Die drei Wissenschaftler werden ausgezeichnet, weil sie «das Rätsel gelöst haben, wie Zellen ihr Transportsystem organisieren», so die Nobelversammlung des Karolinska-Instituts. Gemeinsam haben die drei Forscher die wesentlichen Schritte der Regulation des Vesikeltransports aufgeklärt.

Päckchen für die Zelle

Jede Zelle funktioniert wie eine kleine Fabrik, bei der Moleküle von anderen Zellen angeliefert und wieder exportiert werden. Dazu ist es wichtig, dass die Moleküle in kleine Bläschen, sogenannte Vesikel, verpackt und zur richtigen Zeit am richtigen Ort in der Zelle – oder nach aussen – wieder freigesetzt werden. Schekman hat die Gene entschlüsselt, die für diesen Vesikeltransport erforderlich sind. Dabei identifizierte er drei Klassen von Genen, die jeweils unterschiedliche Facetten des Zelltransports kontrollieren. Rothman wiederum hat entdeckt, wie Proteine in der Zell-

membran und auf der Vesikeloberfläche passgenau aneinander binden können, damit die mit Molekülen gefüllten Transportvesikel ihren Inhalt auch an der richtigen Stelle freisetzen. Dafür haben nämlich sowohl die Proteine auf den Vesikeln als auch jene auf den Bläschen bestimmte Strukturen, die wie bei einem Klettverschluss genau zueinander passen. Südhof schliesslich hat bei seinen Forschungen an Nervenzellen herausgefunden, wie Neurotransmitter die Vesikel dazu bringen, ihren Inhalt am Bestimmungsort an der Synapse auszuschütten – indem Calcium-Ionen eine entscheidende Vermittlerrolle übernehmen. Südhofs Forschungen bilden eine wichtige Grundlage, um beispielsweise Medikamente gegen Alzheimer oder Parkinson zu entwickeln.



James Rothman von der Yale University in New Haven

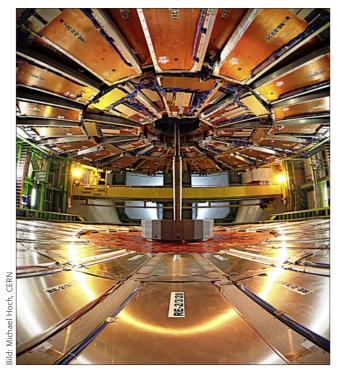
3ild: Yale L

Ehrung für das Higgs-Boson

Auch wenn dieses Jahr keiner der naturwissenschaftlichen Nobelpreise direkt in die Schweiz gegangen ist, können sich mehrere Schweizer Forschungseinrichtungen am Nobelpreis für Physik freuen. Diesen bekommen nämlich François Englert und Peter Higgs, die ab Mitte der sechziger Jahre ein allen physikalischen Kräften zugrunde liegendes Higgs-Kraftfeld und ein bis dato unbekanntes Higgs-Teilchen postulierten. Doch keine noch so gute Vorhersage ist etwas wert, wenn sie nicht bewiesen wird – und das geschah 2012 am CERN in Genf. Nach fast fünfzig Jahren konnte am dortigen Teilchenbeschleuniger Large Hadron Collider (LHC) mit dem ATLAS- und dem CMS-Detektor das sogenannte Higgs-Boson mit hoher Wahrscheinlichkeit nachgewiesen werden.

Physiker der Universität Zürich sind seit 1995 am CMS-Detektor tätig: Zusammen mit Kollegen der ETH Zürich, dem Paul-Scherrer Institut und der Schweizer Industrie entwickelten und bauten sie die innerste Komponente des Detektors, den sogenannten CMS-Pixel-Detektor. Dieser misst mit sehr hoher Genauigkeit die Energie und den Impuls von Photonen, Elektronen, Myonen und anderen geladenen Partikeln. Somit sind auch Schweizer Forschungseinrichtungen an dem Erfolg mitbeteiligt.

Englert und Higgs haben die Theorie entwickelt und bekommen erst jetzt den Nobelpreis, weil das Teilchen mit hoher Wahrscheinlichkeit, sehr viel Aufwand, Geld, Geschick und Innovation Dritter nachgewiesen wurde. Daher hätte das Nobelpreiskomitee das CERN durchaus als dritten Preisträger mit würdigen können.



Der CMS-Detektor am CERN





Meisterstück

Spitzentechnologie, um niedrigste Quantifizierungsgrenzen zu erreichen – das LCMS-8050 erfüllt die wachsende Nachfrage nach selektiven Nachweismethoden im Spurenbereich, etwa für die klinische Forschung, für Umwelt- oder Nahrungsmittelsicherheit. Das Flaggschiffmodell der UFMS-Produktlinie (Ultra-Fast Mass Spectrometry) verbindet höchste Empfindlichkeit mit bester Datenqualität und den weltweit schnellsten Datenakquisitionsraten.

- Optimierte Empfindlichkeit im Attogramm-Bereich durch eine neu entwickelte, beheizte ESI-Quelle und die UFsweeper[®]III Kollisionszellentechnologie
- Ideale Plattform für ein produktives Labor in Kombination mit der Nexera UHPLC
- Einfache Wartung der Ionenquelle (Wechsel von ESI zu APCI) und der Transferkapillare

www.shimadzu.ch



