



"Soft-Matter Seminar"

Das Eisenzentrum des

NO-Transportproteins Nitrophorin 2

DFT-Rechnungen zur Interpretation von Kernresonanz-Schwingungsspektren

Dipl.–Phys. Beate Moeser

TU Kaiserslautern

Abstract

Nitrophorine sind Hämproteine, die im Speichel von blutsaugenden Wanzen vorkommen. Beim Blutsaugen gelangen sie in die Blutbahn des Opfers und geben dort ein NO-Molekül ab, welches an das Eisenzentrum ihrer Hämgruppe gebunden war. Dieses löst dann eine Signalkaskade aus, die zur Erweiterung der Blutgefäße führt und die Aggregation von Blutplättchen an der Injektionsstelle verhindert. Dadurch wird der Blutfluss zum Insekt gesteigert.

Um die reversible Bindung zwischen NO und Hämeisen genauer zu charakterisieren, wurde das Protein Nitrophorin 2 mit Kernresonanz-Schwingungsspektroskopie untersucht. Diese Methode erlaubt es, selektiv nur die Molekülschwingungen des Proteins zu messen, an denen das Eisenatom beteiligt ist. Sie liefert allerdings keine Informationen über den Charakter der gemessenen Schwingungen, sodass sich die Interpretation der Spektren schwierig gestaltet.

In diesem Vortrag werden ab initio DFT-Berechnungen der Kernresonanz-Schwingungsspektren des Nitrophorin 2 vorgestellt. Sie ermöglichen es, die Messdaten zu verstehen und einzelnen Banden im Spektrum Schwingungen zuzuordnen. Darüber hinaus bieten die DFT-Rechnungen weitere Einblicke in die Struktur des Eisenzentrums der Nitrophorine

Donnerstag, den 16.9.2010

14:00 Uhr

Raum PH 3344

Prof. Dr. Roland Netz

Physik-Department T 37, Technische Universität München, Theoretische Physik
85747 Garching