

# Supercomputer deckt mögliche Entstehung erster Lebensbausteine auf

## Peptide könnten in chemischen Reaktionen auch außerhalb von Zellen entstanden sein

[14. Februar 2008]

**Jülich/Bochum, 14. Februar 2008 - Das Leben könnte seine ersten Schritte vor 4 Milliarden Jahren auf rein chemischem Weg genommen haben. Einfache Aminosäuren könnten sich unter den richtigen Bedingungen zu langen Peptidketten zusammengeschlossen und so die ersten Bausteine des Lebens gebildet haben, ohne auf eine biologische "Synthesemaschine" zurückzugreifen. In der aktuellen Ausgabe der renommierten Fachzeitschrift Journal of the American Chemical Society (JACS) zeigen nun Forscher der Ruhr-Universität Bochum, wie eine derartige urzeitliche Peptidsynthese auf chemischem Wege abgelaufen sein könnte. Die zugehörigen Simulationen machten die Wissenschaftler auf dem Supercomputer JUBL des Forschungszentrums Jülich.**

"Wir untersuchen chemische Reaktionen, die möglicherweise eine Schlüsselrolle für den Ursprung des Lebens gespielt haben", erklärt Dominik Marx, Theoretischer Chemiker von der Ruhr-Universität Bochum, seine Arbeit mit dem Supercomputer. Er und sein Team stellen in ihren Simulationen die chemischen Vorgänge quasi im "virtuellen Labor" nach, wie sie vor Urzeiten an vulkanischen Schloten in den Tiefen der Ozeane abgelaufen sein könnten. "Diese Drücke und Temperaturen kann man nur sehr schwer kontrolliert im Labor erzielen", sagt Eduard Schreiner, der Erstautor. "Deshalb werden sie simuliert." Nach vier Monaten Rechenzeit auf 2000 Prozessoren des Supercomputers JUBL fand die Gruppe heraus, wie sich die Aminosäuren zu den Bausteinen des Lebens, den Peptiden, unter diesen Extrembedingungen zusammenfinden können. "Der Rechenaufwand für die nun publizierte Untersuchung stellt wohl einen neuen Weltrekord auf dem Gebiet der ab initio Molekulardynamik auf", berichtet Marx.

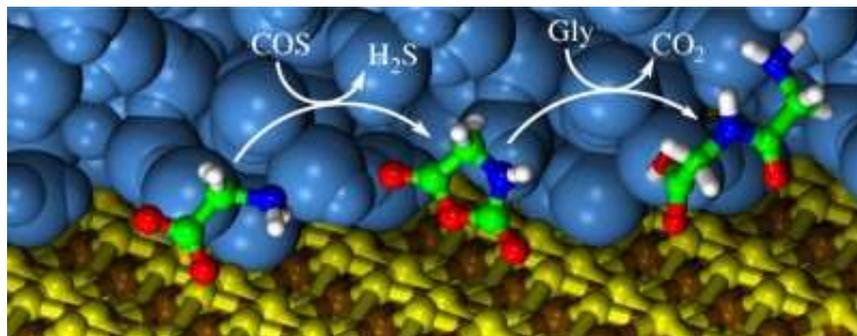
Die Studie zeigt, dass komplexe Biomoleküle auf rein chemischem Wege entstehen können, also ohne Rückgriff auf ausgereifte biologische "Synthesemaschinen" wie das Ribosom. Grundlage ist das so genannte "Eisen-Schwefel-Welt"-Szenario. Komponenten dieser Hypothese sind einerseits Oberflächen von Eisen-Schwefel-Mineralien und andererseits hohe Temperaturen und hoher Druck des Wassers als Medium, in dem die Synthese von Peptiden in einem "Peptidzyklus" ablaufen soll. Da es schwierig ist, solche Reaktionen bei mehreren hundert Grad und Bar kontrolliert durchzuführen, verlegten die Chemiker das Experiment eben ins virtuelle Labor. "Wir haben unsere Probe zuzusagen im Computer einfach erhitzt, zusammengedrückt und geschaut was sich verändert", verdeutlicht Mitautor Nisanth Nair. Das überraschende Ergebnis war, dass sich unter den gewählten Bedingungen die Peptidbildung in der Tat beschleunigt.

Zugang zum Superrechner JUBL haben etwa 25 Forschergruppen. "Diese 25 Teams nutzen für ihre Simulationen auf JUBL allerdings rund fünfmal mehr Rechenzeit als die 200 Nutzergruppen der anderen Jülicher Supercomputer", erklärt Dr. Norbert Attig, Leiter der Jülicher Abteilung HPC Anwenderunterstützung. Dementsprechend hoch sind die Kriterien, die an die Recheneffizienz der Programme gestellt werden. "Programme auf JUBL müssen vorher beweisen, dass sie die große Zahl der Prozessoren, das schnelle Netzwerk und die Ein- und Ausgabe von Daten optimal nutzen. Dafür können sich die Ergebnisse nachher auch sehen lassen", meint Attig und freut sich mit den Bochumer Kollegen über die neuen Erkenntnisse zum möglichen Ursprung des Lebens, die mit dem

Programmpaket "CPMD" erzielt wurden.

Fachartikel im Netz E. Schreiner, N. N. Nair, and D. Marx, Influence of Extreme Thermodynamic Conditions and Pyrite Surfaces on Peptide Synthesis in Aqueous Media, J. Am. Chem. Soc. ("Three-Page Communication" to the Editor),

ASAP Article 10.1021/ja7108085, download from



Glyzin (links), aktiviertes Glyzin (Mitte) und GG Dipeptid (rechts) an der Grenzfläche von Pyrit zu Wasser und Extrembedingungen. Foto: E. Scheiner, N.N. Nair, und D. Marx (RUB)  
Bild als JPG-Datei zum herunterladen (342 KB)

## **Ansprechpartner:**

Professor Dominik Marx, Lehrstuhl für Theoretische Chemie, Ruhr-Universität Bochum  
E-Mail: dominik.marx@theochem.rub.de  
Internet: www.theochem.rub.de  
Tel. 0234/32-28083,

Bildmaterial und Pressemitteilung der Ruhr-Universität Bochum:  
Mehr zu den Jülicher Supercomputern

## **Pressekontakt:**

Kosta Schinarakis  
Tel. 02461 61-4771  
E-Mail:k.schinarakis@fz-juelich.de