



6. Oktober 2014  
52/14

Pressedienst

## Neues Verfahren zur Beobachtung von Molekülbewegungen

Kristallographie ermöglicht es, die Struktur von Molekülen zu analysieren. Im Fachmagazin „Nature Methods“ beschreibt ein Forschungsteam unter der Leitung von Prof. Arwen Pearson vom Hamburg Centre for Ultrafast Imaging (CUI) jetzt eine neue Art der sogenannten zeitaufgelösten Kristallographie. Diese Methode zur Beobachtung von Strukturänderungen in Molekülen erlaubt es einer deutlich größeren Zahl von Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftlern als bisher, Proteindynamik zu analysieren. „Die Natur bewegt sich. Und um sie zu verstehen, müssen wir in der Lage sein, die Bewegungen biologischer Strukturen auf atomarer Ebene zu beobachten“, sagt Prof. Pearson, die an der University of Leeds geforscht hat, bevor sie im Mai an die Universität Hamburg in den Exzellenzcluster CUI wechselte. Das Verständnis atomarer Strukturveränderungen ist eine Voraussetzung für die Entwicklung neuer, nebenwirkungsfreier Medikamente und von intelligenten funktionellen Materialien der nächsten Generation.

Bei der traditionellen Kristallographie wird ein Kristall mit Röntgenstrahlen beschossen. Die Art, wie die Strahlen von den Atomen im Kristall gebrochen werden, lässt Rückschlüsse auf seine Struktur zu. Allerdings zeigt das gewonnene Beugungsbild nur den Durchschnitt aller Moleküle und ihrer Bewegungen in einem Kristall während der Zeitdauer des Experiments. Solch ein statisches Bild reicht nicht aus, um zu erforschen, wie molekulare Strukturen arbeiten; dafür benötigt man bewegte Bilder.

Gegenwärtig werden bewegte Bilder mit zeitaufgelöster Kristallographie erzeugt. Doch bei der bislang verwendeten Methode können die Schnappschüsse nur für einen sehr kurzen Moment sichtbar gemacht werden, um die Molekular-Bewegung einzufangen. Das bedeutet, dass nur ein außerordentlich kurzer Moment zur Verfügung steht, um mit Hilfe des Lichtpulses ein kristallographisches Bild zu erzeugen. Derzeit können weltweit nur drei Synchrotrons – in den USA, in Frankreich und in Japan –, die dafür benötigten starken Strahlen erzeugen.

Die von Prof. Pearson entwickelte Methode basiert sich auf der mathematischen Methode der Hadamard Transformation, bei der Informationen anders dargestellt werden – so wie etwa Bildinformationen auf Negativen in Falschfarben erscheinen –, so dass deutlich weniger starke Strahlungsquellen erforderlich sind. Die durch die Hadamard Transformation definierten Pulse erzeugen ein einzelnes kristallographisches Bild wie ein sehr lang belichtetes Foto. Das Experiment wird mit einer Serie von Lichtpulsen wiederholt und erzeugt weitere „lang belichtete Fotos“.

Zwar ist jedes einzelne dieser Fotos unscharf; aus den Unterschieden der einzelnen Bilder und der Lichtpuls-Formen ergibt sich aber die für einen Film nötige zeitaufgelöste Information.

„Das Wunderbare an der Methode ist, dass wir keine scharfen Bilder und deswegen auch keine brillanten Strahlen benötigen“, sagt Arwen Pearson. „Diese neue Methode bedeutet, dass Wissenschaftler nicht mehr nur die drei Großanlagen benutzen müssen, sondern dass sie jede Strahlführung nutzen können, zum Beispiel auch die Strahlungsquelle PETRA III bei DESY.“

**Originalveröffentlichung:**

Yorke, Beddard, Owen, and Pearson

**“Time-resolved crystallography using the Hadamard Transform”**

DOI: 10.1038/nmeth.3139

**Für Rückfragen:**

Prof. Arwen Pearson

The Hamburg Centre for Ultrafast Imaging (CUI)

Tel.: 040/8998-6650

E-Mail: [Arwen.pearson@cfel.de](mailto:Arwen.pearson@cfel.de)

Dr. Briony Yorke

The Hamburg Centre for Ultrafast Imaging (CUI)

Tel.: 040/8998-6655

E-Mail: [Briony.yorke@cfel.de](mailto:Briony.yorke@cfel.de)