

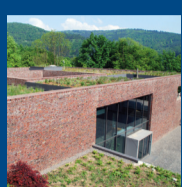
Pia Grzesiak as Journalist in Residence at HITS



In April 2013, **Pia Grzesiak** will join HITS as the new Journalist in Residence. A biologist and freelance science journalist, she has been working for both national and international television broadcasters, for instance, arte, WDR, ABC TV and SWR. During her stay as a Journalist in Residence she plans to visualize HITS research topics. The 'Journalist in Residence' program enables experienced science journalists to gain knowledge in different fields of data-driven research without the pressure of daily business.

New junior research group at HITS

In February 2013, a junior research group named **Computational Biology (CBI)** was established. Group leader is Dr. Siegfried Schloissnig (see 'Portrait'). Prof. Eugene "Gene" Myers (Max-Planck-Institute for Molecular Cell Biology and Genetics, Dresden) is affiliated with the group as a mentor. Together with his laboratory, CBI will deal with problems like deciphering the genetic code of flatworms.



HITS Open Day, Saturday June 8, 11-17 h

HITS

Humboldt scholar at HITS



In January, HITS once again welcomed **Richard Henchman** (University of Manchester) as a visiting scientist. He already worked with the MBM group (Dr. Frauke Gräter) for two months in 2012. Dr. Henchman was awarded a Humboldt Research Fellowship for experienced researchers. This allows carrying out a long-term research project with an academic host in Germany. Richard Henchman will stay at HITS for eight months.

Appointment

Prof. Rebecca Wade (MCM) joined the Scientific Advisory Council of the Leibniz-Institut für Molekulare Pharmakologie (FMP). The FMP, located on the biomedical campus in Berlin, is a member institute of the Leibniz Association. Research is conducted within three sections: Molecular Physiology & Cell Biology, Chemical Biology and Structural Biology.

New Visiting Scientists

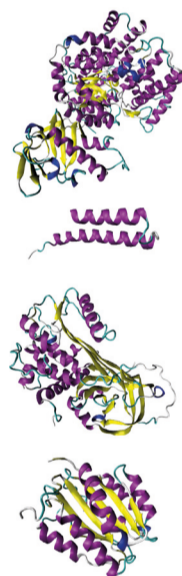
Beifei Zhou (Klaus Tschira Lab, Shanghai) became part of the MBM group (Dr. Frauke Gräter) in September 2012. **Mustafa Ghulam** (DAAD scholarship holder from Karachi) joined Prof. Rebecca Wade's MCM group in December. **Nafise Moosavi**, HITS scholarship holder (Sharif University of Technology, Tehran), has been staying with the NLP group (Prof. Michael Strube) since February 2013.

New Staff Members

Elina Wetsch, a former DHBW-student at HITS, joined the SDBV group (Dr. Wolfgang Müller) as a web developer November 2012. In December 2012, **Daraksha Parveen** came to the NLP group (Prof. Michael Strube) on a doctoral grant. In February 2013, several new staff members joined HITS: IT specialist **Ivan Savora** (SDBV group), and the PostDocs **Dr. Davide Mercadante** (HITS scholarship) and **Dr. Maxime Louet** (MBM group).

HITSTERS

Protein origami: Quick folders are the best



Proteins are elementary building blocks of life. In order to become active, they have to fold into 3D-structures. Misfolding of proteins can lead to diseases such as Alzheimer's or Creutzfeldt-Jakob. So which strategies did nature develop over the course of evolution to improve protein folding? Dr. Frauke Gräter and Cedric Debes (MBM) together with Prof. Gustavo Caetano-Anolles from the University of Illinois examined the folding speed of all currently known proteins, which developed 3.8 billion years ago or later. The result is: For most of this period, the folding speed was increasing, from archaea to multicellular organisms. 1.5 billion years ago, more complex structures emerged and caused a biological 'Big Bang'. This has led to the development of slower-folding protein structures. However, the tendency towards higher speed in protein origami overall dominated, regardless of the length of amino acid chains constituting the proteins.

In their work, the researchers used an interdisciplinary approach combining genetics and biophysics. "It is the first analysis to combine all known protein structures and genomes with folding rates as a physical parameter," says Dr. Gräter. The research work was published in PLoS "Computational Biology".

Small change for a big improvement – halogen bonds and drug discovery

Halogen chemistry has been exploited by medicinal chemists for nearly 70 years. However, it did not find much application in drug development industry. Dr. Agnieszka Bronowska (MBM) in collaboration with the scientists from the Czech Academy of Science in Prague developed a new tool for the usage of halogen bonds for drug discovery applications. By approximating the positively charged sigma-hole, which is responsible for the stabilizing character of halogen bonding, with a massless, charged pseudatom, the scientists incorporated a quantum-chemical effect into faster computational methods applicable to structure-based drug design. The new method was published in "Chemical Communications".

RESEARCH

Siegfried Schloissnig: „I'm interested in complex and dynamic systems.”



From his office window he has a view of the Villa Bosch, but Siegfried Schloissnig has no time to enjoy it: He has to find three staff members for the new junior group, and to coordinate the collaboration with colleagues from Dresden. However, the native Carinthian seems to be very relaxed: "I have always enjoyed dealing with new topics – it keeps the scientist in me awake." As a student of Computer Science, he often attended biology lectures. After graduation, he switched to glycobiology and began studying collective genomes of intestinal bacteria. But why did he abandon Computer Science for the sake of biology? "I'm interested in complex and dynamic systems, and there are plenty of those in biology."

Schloissnig's career: From 1998 to 2005, he studied Computer Science at the University of Karlsruhe (today: KIT). He obtained his PhD in Human Biology at the German Cancer Research Center (DKFZ) in 2010 and was part of the Bork group at the European Molecular Biology Laboratory (EMBL) from 2010 until 2013. In February 2013, Siegfried Schloissnig joined HITS as group leader of the newly established Computational Biology junior research group.

The aim of the 33-year-old researcher is to solve complex biological problems with the help of Computer Science. The first project is the analysis of the genetic code of flatworms. These are of interest for regenerative medicine: "If a flatworm is cut in two pieces, each half will develop into a new worm," explains Siegfried Schloissnig. The genomes haven't yet been deciphered because of their complex structure. "Two-thirds of the worm genome keep recurring. It's like a jigsaw puzzle. And two-thirds of this puzzle consist of white particles that are nearly identical."

Together with Gene Myers' Laboratory in Dresden, the new HITS junior group will compare the currently available gene sequences of 30 worm species. The Dresden group will use next-generation DNA-sequencers. The computational analysis will be performed at HITS. "I'm going to develop new algorithms and piece together the jigsaw puzzle." Siegfried Schloissnig smiles, and looks out of the window at the Villa Bosch.

IMPRINT | DR. PETER SAUERESSIG (VISOP), SAUERESSIG@HITS.ORG, TEL. +49 - 6221 - 533 245
IMAGES: HITS, BERNHARD KREUTZER | WWW.HITS.ORG

PORTRAIT

NR. 10 | 03-2013

THE
CHARTS

Heidelberger Institut für
Theoretische Studien



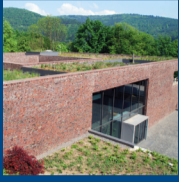
Pia Grzesiak als „Journalist in Residence“ am HITS



Im April 2013 wird die freie Wissenschaftsjournalistin **Pia Grzesiak** als „Journalist in Residence“ ans HITS kommen. Seit über zehn Jahren arbeitet die Diplom-Biologin für nationale und internationale Fernsehsender wie arte, WDR, ABC TV und SWR. Ihre Zeit als „Journalist in Residence“ möchte sie dazu nutzen, Forschungsthemen des HITS zu visualisieren. Das Programm „Journalist in Residence“ bietet erfahrenen Wissenschaftsjournalisten die Möglichkeit, sich unabhängig vom Druck des Tagesgeschäfts in verschiedene Bereiche der datengetriebenen Forschung einzuarbeiten.

Neue Junior-Forschungsgruppe am HITS

Im Februar 2013 nahm die neue Junior-Forschungsgruppe „**Computational Biology**“ (CBI) unter der Leitung von Dr. Siegfried Schloissnig (siehe „Portrait“) ihre Arbeit am HITS auf. Mentor der Gruppe ist Prof. Gene Myers. Gemeinsam mit seiner Gruppe am Max-Planck-Institut für Molekulare Zellbiologie und Genetik in Dresden will die Junior-Gruppe den genetischen Code von Plattwürmern entschlüsseln.



Tag der offenen Tür am HITS: Samstag, 8. Juni 2013, 11-17 Uhr

HITS

Humboldt-Stipendiat am HITS



Seit Januar 2013 arbeitet **Richard Henchman** (University of Manchester) erneut als Gastwissenschaftler am HITS. Im Jahr 2012 war er bereits zwei Monate lang als Gastwissenschaftler in der MBM-Gruppe (Dr. Frauke Gräter) tätig gewesen. Dr. Henchman erhielt ein Humboldt-Forschungsstipendium für erfahrene Wissenschaftler. Es ermöglicht einen langfristigen Forschungsaufenthalt an einer wissenschaftlichen Einrichtung in Deutschland. Richard Henchman wird acht Monate lang am HITS forschen.

Ernennung

Prof. Rebecca Wade (MCM) wurde Mitglied des wissenschaftlichen Beirats am Leibniz-Institut für Molekulare Pharmakologie (FMP). Das FMP mit dem Sitz auf dem biomedizinischen Campus in Berlin gehört zur Leibniz-Gemeinschaft. Die Forschung umfasst folgende Bereiche: „Molekulare Physiologie und Zellbiologie“, „Chemische Biologie“ und „Strukturbiologie“.

Neue Gastwissenschaftler

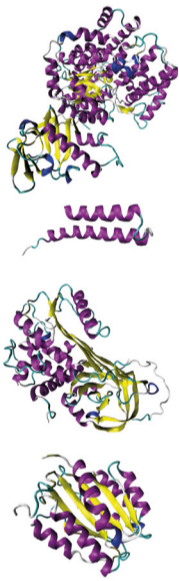
Seit September 2012 arbeitet **Beifei Zhou** (Klaus Tschira Lab, Shanghai) als Gastwissenschaftlerin in der MBM-Gruppe (Dr. Frauke Gräter). **Ghulam Mustafa** (DAAD Stipendiat, Karachi) kam im Dezember in die MCM-Gruppe von Prof. Rebecca Wade. Seit Februar 2013 forscht **Nafise Moosavi** (Sharif University of Technology, Teheran) im Rahmen ihres HITS-Stipendiums in der NLP-Gruppe (Prof. Michael Strube).

Neue Mitarbeiter

Im November 2012 nahm **Elina Wetsch**, frühere DHBW-Studentin am HITS, ihre Arbeit als Web Developer in der SDBV-Gruppe (Dr. Wolfgang Müller) auf. Im Dezember kam Daraksha Parveen als Pre-Doc in die NLP-Gruppe (Prof. Michael Strube). Gleich mehrere neue Mitarbeiter durfte das Institut im Februar 2013 begrüßen: Softwareentwickler **Ivan Savora** (SDBV-Gruppe), die PostDocs **Dr. Davide Mercadante** (HITS-Stipendiat) und **Dr. Maxime Louet** (beide MBM-Gruppe).

HITSKÖPFE

Protein-Origami: Schneller falten ist besser



Proteine sind elementare Bausteine des Lebens. Damit sie aktiv werden können, müssen sie sich in 3D-Strukturen falten. Fehlfaltung von Proteinen führt zu Krankheiten wie Alzheimer oder Creutzfeldt-Jakob. Welche Strategien hat die Natur im Laufe der Evolution entwickelt, um die Faltung von Proteinen zu verbessern?

Dr. Frauke Gräter und **Cedric Debes** (MBM) untersuchten gemeinsam mit Prof. Gustavo Caetano-Anolles von der University of Illinois die Faltungsgeschwindigkeit aller heute bekannten Proteine, die vor bis zu 3,8 Milliarden Jahren entstanden sind. Das Ergebnis: Die Geschwindigkeit nahm zu, von den Urbakterien bis hin zu den Mehrzellern. Als vor 1,5 Milliarden Jahren komplexere Strukturen auftauchten und einen biologischen „Urknull“ verursachten, entstanden zwar auch Proteinstrukturen, die langsamer falteten. Aber die Tendenz zu mehr Tempo im Protein-Origami ist dominierend, unabhängig von der Länge der Aminosäureketten, die die Proteine bildeten.

Die Forscher setzten auf einen interdisziplinären Ansatz, der Genetik mit Biophysik verbindet. „Es ist die erste Analyse, die alle bekannten Proteinstrukturen und Genome mit Faltungsraten als einer physikalischen Größe verbunden hat“, so Frauke Gräter. Die Arbeit wurde in „PLoS Computational Biology“ veröffentlicht.

Kleine Veränderung, große Wirkung – Halogenbindungen in der Medikamentenforschung

Halogenchemie wird seit fast 70 Jahren von Medizinchemikern verwendet, jedoch kaum in der Medikamentenentwicklung. **Dr. Agnieszka Bronowska** (MBM) entwickelte gemeinsam mit Forschern von der tschechischen Akademie der Wissenschaften, Prag, ein neues Verfahren zur Anwendung von Halogenbindungen in der Medikamentenforschung. Dabei werden die Sigma-Löcher, also die positiv geladene Halogen-Regionen, die für den stabilisierenden Charakter von Halogenbindungen verantwortlich sind, einem masselosen, geladenen Pseudo-Atom angenähert. Dadurch konnten die Forscher einen quantenchemischen Effekt in schnellere computergestützte Analyseverfahren in der strukturbasierten Medikamentenentwicklung integrieren. Das neue Verfahren wurde in „Chemical Communications“ publiziert.

FORSCHUNG

Siegfried Schloissnig: „Mich interessieren komplexe und dynamische Systeme.“



Von seinem Fenster aus kann er die Villa Bosch sehen, aber Siegfried Schloissnig hat gerade anderes zu tun: Drei Mitarbeiterstellen für die neue Juniorgruppe sind zu besetzen, die Zusammenarbeit mit den Dresdner Kollegen muss koordiniert werden. Der gebürtige Kärntner wirkt dabei ganz gelassen: „Ich bin immer gerne in eine neue Thematik hineingesprungen, das hält mich als Wissenschaftler wach.“ Schon im Informatikstudium war er Gasthörer in Biologie-Vorlesungen, wechselte nach dem Diplom in die Glykobiologie und befasste sich als Postdoc mit den kollektiven Genomen von Darmbakterien. Warum zog es ihn von der reinen Informatik zur Biologie? „Mich interessieren komplexe und dynamische Systeme, und die Biologie ist voll davon.“

Schloissnigs Stationen: 1998 Informatikstudium an der Universität Karlsruhe (heute: KIT), 2005 Diplom. Promotion am Deutschen Krebsforschungszentrum (DKFZ) in Humanbiologie. Ab 2010 Postdoc am Europäischen Molekularbiologischen Laboratorium (EMBL) in der Bork Group. Seit Februar 2013 ist Siegfried Schloissnig Junior Group Leader in der neu eingerichteten Forschung „Computational Biology“ am HITS. Hier will der 33-jährige mit Informatik komplexe biologische Probleme lösen und den genetischen Code von Plattwürmern „knacken“. Diese sind für die regenerative Medizin interessant: „Wenn man sie zerschneidet, entstehen aus den Teilen neue Würmer“, erklärt er. Ihre Genome sind bisher nicht entzifferbar, weil ihre Struktur zu kompliziert ist. „Zwei Drittel des Wurmgenoms wiederholen sich ständig - wie ein Puzzle, das zu zwei Dritteln aus weißen Teilchen besteht, die sich nur minimal voneinander unterscheiden.“ Gemeinsam mit dem Labor von Gene Myers in Dresden wird die neue HITS-Juniorgruppe die vorhandenen Gensequenzen von 30 Wurmartarten vergleichen. In Dresden kommen neue Sequenziergeräte zum Einsatz, die rechnerische Auswertung findet am HITS statt. „Ich werde neue Algorithmen entwickeln, um das Puzzle zusammensetzen“, sagt Siegfried Schloissnig und schaut schmunzelnd aus dem Fenster, die Villa Bosch im Blick.

IMPRESSUM | DR. PETER SAUERESSIG (VISDP), SAUERESSIG@HITS.ORG, TEL. +49 - 6221 - 533 245 FOTOS: HITS, BERNHARD KREUTZER | WWW.HITS.ORG

PORTRAIT

NO 10 | 03-2013

Heidelberg Institute for
Theoretical Studies



THE
CHARTS