

## HITS in Zeiten von Corona

Dieses Jahr sollte ein Jahr zum Feiern werden, aber die Pandemie machte alle unsere Pläne zunichte. Deshalb haben wir uns entschlossen, alle noch anstehenden Veranstaltungen im Rahmen unseres 10-jährigen Jubiläums ins Jahr 2021 zu verschieben. Viele andere Veranstaltungen wie Workshops und Vorträge wurden entweder abgesagt oder online abgehalten. Aber was machen eigentlich die HITS-Forscher/-innen in Zeiten von Corona? Genau das: Sie forschen „gegen Corona.“ Die HITster helfen mit Softwaretools und -methoden, das Virus zu bekämpfen. Und sie arbeiten an Großprojekten zur Kartierung der Krankheit und zur Sammlung von notwendigen Daten für die Wissenschaft mit.

**Rebecca Wade** und ihre Gruppe Molecular and Cellular Modeling (MCM) beteiligen sich an der Suche nach Wirkstoffen gegen SARS-CoV-2, dem Virus, das COVID-19 auslöst. Sie wollen die molekularen Schwachstellen des Virus finden und greifen dabei auf bereits von ihnen entwickelte Tools für computer-gestützte Wirkstoffsuche zurück. Für ihre Forschung, die den Einfluss bestimmter Moleküle auf den

Infektionsprozess untersucht, waren sie mit ihrem Antrag auf Rechenzeit an einem der europäischen Supercomputer erfolgreich (siehe *HITS-Köpfe*). Die Gruppe Scientific Databases and Visualization (SDBV) unter Leitung von **Wolfgang Müller** spielt eine wichtige Rolle im Datenmanagement mehrerer

ches Datenmanagement in den Lebenswissenschaften bei. Außerdem ist SDBV-Mitarbeiter **Martin Golebiewski** an der „RDA COVID-19 Clinical Subgroup“ der International Research Data Alliance (RDA) beteiligt. Die Gruppe aus 80 Wissenschaftler/-innen erarbeitet Empfehlungen für das Management von



internationaler und nationaler Projekte gegen SARS-CoV-2. Das Team arbeitet z.B. an der „COVID-19 Disease Map“ mit, einer internationalen Initiative. Diese Initiative will die molekularen Prozesse erforschen, die der Interaktion zwischen Virus und Wirt zu Grunde liegen. Das Konsortium umfasst 196 Mitglieder aus 31 Staaten. Die HITster steuern zu diesem Projekt ihre SEEK Software Suite für wissenschaftl-

COVID-19 Daten. In all diesen Projekten arbeiten Menschen, deren „tägliches Brot“ der Umgang mit rechnerischen Methoden und computergestützten Werkzeugen ist. Deshalb haben die HITS-Forscher/-innen auch in Zeiten von Corona viel zu tun – datengetriebene und computergestützte Forschung funktioniert nach wie vor ohne große Einschränkungen, ob am Institut oder im „Homeoffice.“



### Via Data

Der HITS-Blog im Jubiläumsjahr ist unter <https://scilogs.spektrum.de/via-data/> zu finden.

## HITS



### Rechenzeit am Supercomputer für HITS-Forschung gegen COVID-19

MCM-Gruppenleiterin **Rebecca Wade** erhält im Rahmen des Forschungsprojekts "DyCoVIn – Interactions and dynamics of SARS-CoV 2 spike-heparin complex." 3.250.000 Core-Stunden am Marconi-Cluster Cineca, einem der größten Rechenzentren Europas.

Ziel des Forschungsprojekts ist die Untersuchung von Molekülen, die am Infektionsprozess von SARS-CoV 2 beteiligt sind, mithilfe von Computersimulationen. Das Team befasst sich mit der Bestimmung der Struktur und Dynamik möglicher Bindungsstellen für heparin-ähnliche Wirkstoffe am Spike-Rezeptor. Dieser Ansatz könnte die

Behandlung viraler Infektionen entscheidend beeinflussen, da Heparin bereits zur Therapie anderer Lungenkrankheiten eingesetzt wird und jüngste klinische Studien darauf hindeuten, dass das Inhalieren von Heparin bei Lungenkrankheiten ein sicheres und wirkungsvolles Mittel ist.

Das Projekt wird am HITS gemeinsam mit der HITS-Gastwissenschaftlerin **Giulia Paiardi** und ihrem Tutor Marco Rusnati von der Universität Brescia in Italien durchgeführt.

### Neue MitarbeiterInnen und GastwissenschaftlerInnen

**AIN:** Jan Plier, Postdoc  
**CST:** Johannes Bracher, Gastwissenschaftler (KIT Karlsruhe)

**HITS Gruppen (06/2020):** Astrominformatics (AIN), Computational Carbon Chemistry (CCC), Computational Molecular Evolution (CME), Computational Statistics (CST), Data Mining and Uncertainty Quantification (DMQ), Groups and Geometry (GRG), Molecular Biomechanics (MBM), Molecular and Cellular Modeling (MCM), Natural Language Processing (NLP), Physics of Stellar Objects (PSO), Scientific Databases and Visualization (SDBV).

## HITSKöpfe

### Zum Zerreißen gespannt

Ein Riss im Sneaker, ein geplatzter Reifen: Materialermüdung ist alltäglich, oft ärgerlich und kann zuweilen auch tödlich enden. Während das Phänomen bei synthetischen Materialien inzwischen gut erforscht ist, liegen die Gründe für Ermüdungserscheinungen im Gewebe von Säugetieren noch im Dunkeln. Ein internationales Forschungsteam unter Leitung von HITS-Gruppenleiterin **Frauke Gräter** (MBM) konnte nun nachweisen, welche negativen Auswirkungen mechanische Belastung auf Kollagengewebe hat. Die Ergebnisse der Studie wurden in der Fachzeitschrift *Nature Communications* veröffentlicht. Sie können wichtige Impulse für Materialforschung und Biomedizin liefern. Synthetische Polymere bilden unter mechanischer Belastung sogenannte Mechanoradikale, die durch den Bruch chemischer Bindungen entstehen. Aber werden diese schädlichen und hochreaktiven Radikale auch in Gewebe erzeugt? Die HITS-Forscher/-innen gingen dieser Frage am Beispiel von Kollagen nach, dem Protein, das unserem Bindegewebe in Knochen, Bändern und Haut strukturelle und mechanische Stabilität verleiht. „Es ist fortwährender mechanischer Belastung ausgesetzt und somit der perfekte Kandidat für unsere Studie“, so Frauke Gräter. Gemeinsam mit Kollegen aus Homburg, Frankfurt und Seattle zeigte das Forscherteam mit speziell entwickelten Experi-

menten, dass Kollagen unter exzessiver mechanischer Belastung Radikale produziert, die dafür bekannt sind, im Körper Schäden und oxidativen Stress hervorzurufen. „Wir konnten die Sehne eines Rattenschwanzes gleichzeitig in die Länge ziehen und mithilfe des Elektronenspinresonanz-Verfahrens messen. Dadurch war es möglich, die Radikale, die beim Ziehen entstehen, zu quantifizieren“, erläutert Erstautor **Christopher Zapp** (MBM) den Versuchsaufbau. Zusätzlich durchgeführte Molekulardynamik-Simulationen bestätigten die Ergebnisse: Chemische Verbindungen brechen, wenn Kollagen gedehnt wird. Die entstehenden schädlichen Radikale werden jedoch von benachbarten aromatischen Seitenketten abgefangen. „Wir haben in Kollagen nicht

nur stabile Radikale gefunden, sondern auch modifizierte Seitenketten, sogenannte DOPAs. Sie schützen die Kollagenstruktur vor weiteren Schäden.“ Die DOPA-Radikale werden in Wasserstoffperoxid umgewandelt, einem wichtigen Signalmolekül. Kollagen überträgt also nicht nur die Kräfte, sondern kann auch die daraus entstehenden Konsequenzen steuern. Die Resultate legen nahe, dass Kollagen im Körper die Rolle eines „Radikalschwamms“ übernimmt. „Kollagen schützt sich selbst vor Radikalen. Wird dieser Mechanismus jedoch überdehnt, kann es zu Schädigungen kommen, von Schmerzen bis hin zu Entzündungen“, fasst Mitautorin und HITS-Alumna **Agnieszka Obarska-Kosińska** zusammen.



Zapp, C., Obarska-Kosińska, A., Rennekamp, B. et al. Mechanoradicals in tensed tendon collagen as a source of oxidative stress. *Nat Commun* 11, 2315 (2020). <https://doi.org/10.1038/s41467-020-15567-4>.

## Forschung

### „Hinter den Kulissen“: Der HITS-Garten

Treffpunkt Rhododendron-Hain: eine haushohe Wand aus Blüten, die in lila Farbtönen leuchten. „Hier hat die Natur gestaltet“, strahlt **Andrea Baumgärtner**, die mit ihren Kollegen **Markus Kohlbecker** und **Milan Bašić** zum Interview gekommen ist. Die drei arbeiten für die KT Abrechnungsdienste e.K. und bilden das Garten-Team für den HITS-Campus und die Villa Bosch. Damit setzen wir unsere Serie „Hinter den Kulissen“ fort, die in diesem Jahr die Teams porträtiert, die das Leben am HITS in irgendeiner Weise viel schöner machen.



#### Wie sieht der Alltag des Gartenteams aus?

**AB:** Wir starten um 7.30 Uhr, im Sommer oder bei Schneefall im Winter auch schon mal um 6 Uhr.

**MK:** Ich setze mich dann hinter das Steuer unserer Multifunktionsmaschine und säubere die Gehwege rund um das Gelände. Je nach Jahreszeit wird sie zur Kehrmaschine oder zum Schneepflug. Wir ergänzen uns sehr gut, das trägt zu unserem Erfolg als Team bei. Ich mähe die Rasenflächen, schneide die Hecken, kümmere mich um die Wassertechnik.

**AB:** Ich konzentriere mich auf die Bepflanzung und schaue, dass ein harmonisches Gesamtbild entsteht. Wir kümmern uns um 45.000 m<sup>2</sup> Gartenfläche, davon allein auf dem HITS-Gelände 32.000m<sup>2</sup>.

#### Was macht eine gute Gärtnerin, einen guten Gärtner aus?

**AB:** Man braucht ein Herz für die Flora, aber auch für die Fauna im Garten. Wir freuen uns über Kaulquappen, Eichhörnchen und Ringelnatter. Die Feuersalamander haben auf dem Gelände eine „Kinderstube“. Man muss die Natur respektieren und die Balance halten: Auch Parasiten gehören dazu und haben eine Funktion.

**MK:** Zum Beispiel sind die Rosensträucher oft voller Läuse. Marienkäferlarven fressen die Läuse. Hier greifen wir nicht ein. Bei der Krötenwanderung schon: In der HITS-Mauer zur Straße hin sind Löcher, durch die Kröten auf das Gelände kommen. Und den Wasserfall schalten wir erst nach Ende der Laichperiode ein.

#### Was ist das Besondere und Faszinierende an diesem Garten?

**MK:** Die große Vielfalt: Vom historischen, symmetrisch angelegten neobarocken Garten bis zum naturnahen Park, der zum Flanieren einlädt.

**AB:** Der Garten ist jeden Tag anders, immer wieder gibt es etwas Neues. Und wer den ganzen Tag am

Computer sitzt, kommt im Garten in Bewegung und tut seinen Lungen, aber auch seinen Augen Gutes.

#### Gibt es einen Lieblingsbaum, den ihr besonders ins Herz geschlossen habt?

**MK:** Ja, den Tulpenbaum unten am Teich.

**AB:** Mir liegen viele Pflanzen am Herzen, vor allem jetzt im Frühling. Mein Liebling aber ist der kleine Blumenhartriegel in der Nähe der HITS-Terrasse.

#### Was sagen die HITster, denen ihr begegnet?

**AB:** In den letzten Jahren sind wir oft direkt angesprochen worden. Manche HITster sind „Stammgäste“ im Garten, von ihnen kommen positive Kommentare.

#### Was sollte man über den HITS-Garten wissen?

**AB:** Der Garten bindet mit 150 Bäumen und vielen Grünflächen viel CO<sub>2</sub>, sogar das Dach ist begrünt. Wir gestalten den Garten, indem wir einen Ausgleich schaffen zwischen dem natürlichen Wuchs und der Anlage.

**MK:** Viele Bäume haben wir gepflanzt oder gepflegt, einige aber sind einfach so gewachsen. Ohne unsere Arbeit wäre hier in ein paar Jahren nur noch Wald. Unterhalb des HITS-Geländes war früher mal ein Wanderweg, der komplett zugewachsen ist.

**AB:** Apropos zugewachsen: Der Rhododendron ist ein gutes Beispiel dafür, was entstehen kann, wenn man nicht eingreift: Er wurde vor 100 Jahren angelegt und wuchs dann über viele Jahrzehnte einfach weiter. So entstand dieser prachttolle Hain. Wenn wir heute Pflanzen anlegen, denken wir immer daran.

Impressum | Dr. Peter Saueressig (Vi.S.d.P.), [saueressig@h-its.org](mailto:saueressig@h-its.org), Tel. +49 6221 533 245 | Bildnachweise: HITS, Annette Mück | [www.h-its.org](http://www.h-its.org)

## Hinter den Kulissen



## The Charts