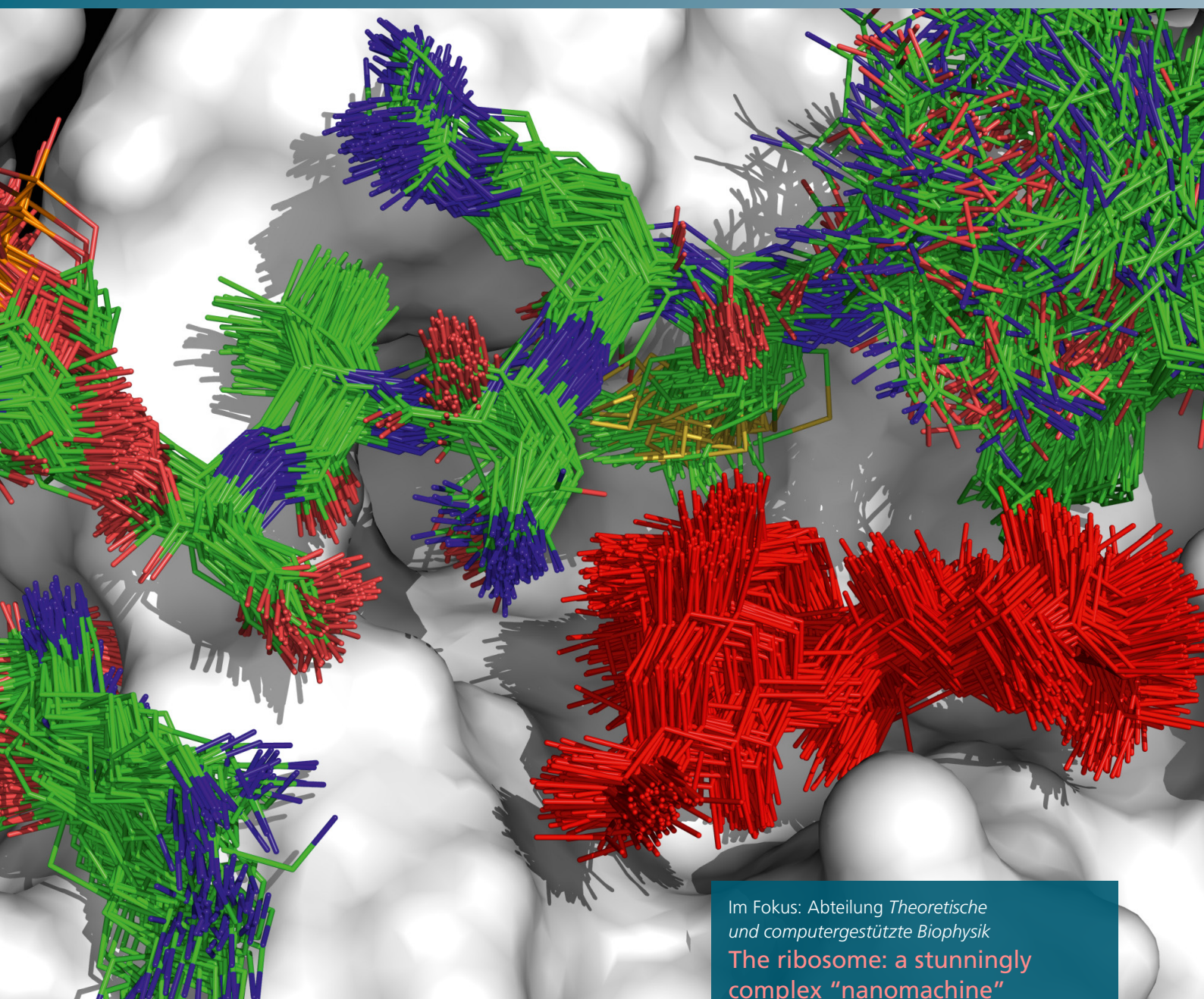




Max-Planck-Institut für biophysikalische Chemie

MPIbpc NEWS

24. Jahrgang | April 2018



Im Fokus: Abteilung *Theoretische und computergestützte Biophysik*

The ribosome: a stunningly complex "nanomachine"

Im Porträt

Facility für *Massenspektrometrie*: Proteine *en masse*

Max-Planck-Campus aktuell

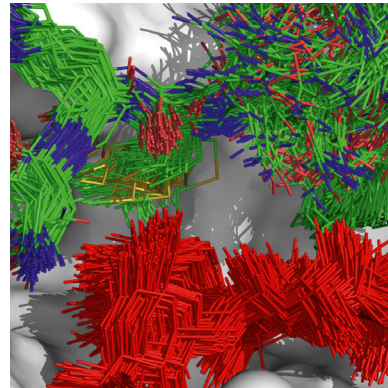
Diesel-Fahrverbot



INHALT

IM FOKUS

- 4 Abteilung *Theoretische und computergestützte Biophysik*:
The ribosome: a stunningly complex “nanomachine”



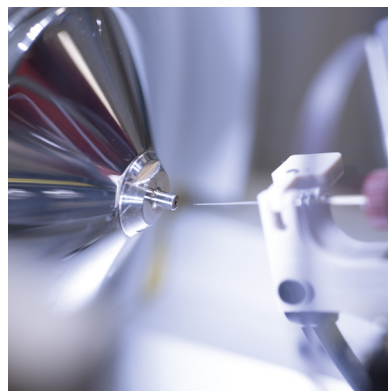
4 *The ribosome: a stunningly complex “nanomachine”*

IM PORTRÄT

- 8 Die Facility für *Massenspektrometrie* von Henning Urlaub

VERANSTALTUNGEN

- 16 Seminar zum Thema Tierethik mit
Vorstellung des *E-Learning*-Programms der MPG
- 19 *Manfred Eigen Award Lecture* mit Peter Schuster



8 *Proteine en masse*



16 *Tierethik-Seminar am MPI-BPC*



20 *Neu: Mehrwegbecher in Kantine und espressobar*

MAX-PLANCK-CAMPUS AKTUELL

- „Mehrweg statt Müllberg!“ 20
- Diesel-Fahrverbot auf dem Max-Planck-Campus 21
- Kunst am Fassberg 22
- GWDG Info 23

Cover image: The nascent peptide (colored) in the ribosomal exit tunnel (grey) is highly dynamic. The image depicts an overlay of conformations of a peptide stalled by an antibiotic (red), as observed in a 2 microsecond molecular dynamics simulation. The peptide is attached to the P-site tRNA (colored, upper left), the amino acid waiting to be appended next is attached to the A-site tRNA (colored, lower left). (*Image: Lars V. Bock / MPI-BPC*)

Titelbild: Das entstehende Peptid (gefärbt) im ribosomalen Ausgangstunnel (grau) ist sehr beweglich. Das Bild zeigt eine Überlagerung von Konformationen eines durch ein Antibiotikum (rot) blockierten Peptids, wie es in einer Molekular-dynamik-Simulation beobachtet wurde. Das Peptid ist an die tRNA an der P-Bindungsstelle (gefärbt, oben links) gebunden. Die Aminosäure, die als nächstes eingebaut werden soll, bindet an die tRNA an der A-Bindungsstelle (gefärbt, unten links). (*Abbildung: Lars V. Bock / MPI-BPC*)

Hinweis: Obwohl aus Gründen der Lesbarkeit im Text die männliche Form gewählt wurde, beziehen sich die Angaben stets auf Angehörige beider Geschlechter.

The ribosome: a stunningly complex “nanomachine”

Lars V. Bock, Michal H. Kolář, Andrea C. Vaiana, Helmut Grubmüller

The ribosome is a macromolecular complex that produces all proteins within the cell in a process called translation. It is thus arguably one of the most important “nanomachines” in all forms of life, ranging from bacteria, and plants to animals and humans. Bacterial ribosomes are also the target of many antibiotics. In the Department of *Theoretical and Computational Biophysics*, and in close collaboration with the *Structural Dynamics* Department headed by Holger Stark and Marina Rodnina’s *Physical Biochemistry* Department at the institute, as well as with external groups, we seek to find out how this complex machinery performs its function at the atomic level. Specifically, we would like to know which molecular forces and conformational motions cause which action, and how these are orchestrated. Or, more specifically, how precisely is the genetic code decoded and translated, what can nevertheless go wrong, and why? And how do antibiotic molecules actually block or reduce the ribosome’s efficiency?

We address these questions using atomistically resolved computer simulations as our main tool, in which the motion of the millions of interacting atoms of which the ribosome is

composed are calculated from fundamental laws of physics. This enables us both to analyze and explain functional motions of the ribosome as well as to validate our results against experiments. Vice versa, our simulations rest on accurate structural information of the ribosome provided by X-ray crystallography or cryo-electron microscopy (cryo-EM).

The ribosome (Fig. 1) is composed of ribonucleic acid (RNA, red and blue) strands and a few dozen proteins. Ribosomes read the genetic blueprint for a protein encoded in the messenger RNA (mRNA) and translate it into a chain of protein building blocks (amino acids), one per work cycle. During each cycle, one amino acid is carried into the ribosome by a transfer RNA (tRNA, yellow and green), which at its opposite side – at the decoding center (near bottom) – presents its respective genetic code to the mRNA. Only the tRNA carrying the correct code is accepted, processed further, and its amino acid is appended at the peptidyl transferase center (PTC) (further up in Fig. 1) to the growing nascent peptide chain, which leaves the ribosome through a long, winded, and narrow exit tunnel (upper right). The process of translation is regulated by several factors (for example EF-Tu, red)

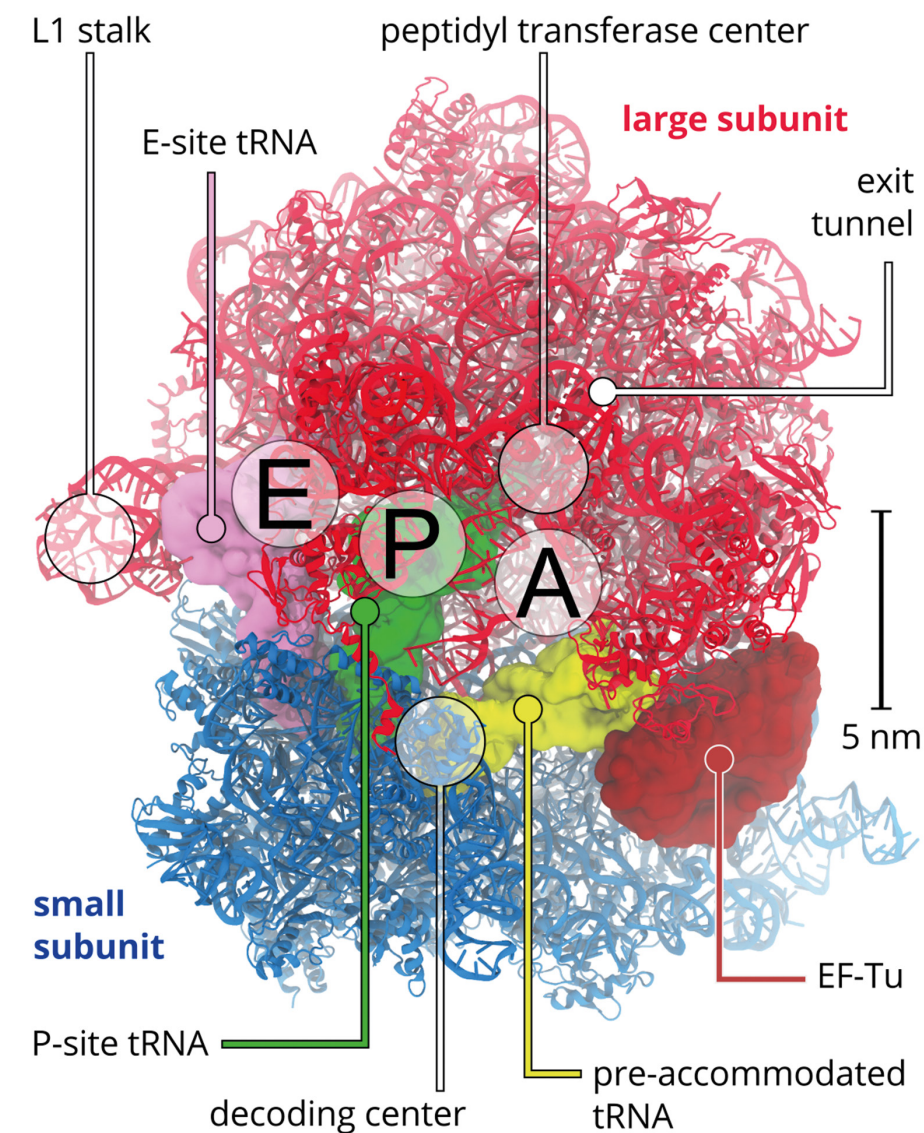


Fig. 1: Anatomy of the bacterial ribosome (adapted from [1]).

and involves cyclic binding of tRNAs into three specific sites on the ribosome (Fig. 1, labeled A, P, and E). The empty tRNA exits the ribosome through the exit site (Fig. 1, labeled E). The ribosome is reset for the next amino acid by shifting the A-site tRNA with the nascent peptide to the P-site.

Our molecular dynamics (MD) simulations of the ribosome [1-3] pose significant numerical challenges, which can be tackled only by high-performance supercomputer facilities. They need to cover, for example, a wide range of length and time scales – from the size of the ribosome, which is tens of nanometers (one nanometer is the millionth part of a millimeter), down to motions as small as atomic bond vibrations (~0.01 nanometers). To resolve these motions, the simulations need to proceed in tiny time steps (each about a femtosecond, which is the 1,000,000,000,000,000th part of a second, pretty short!). However, the simulations need to cover at least part of the time span at which the much slower motions of the ribosome occur (between microseconds and milliseconds). This is the second – and the most limiting – challenge in our computational approach. Despite the large computational resources provided by the Max Planck

Society, the GWDG, and the Leibniz Supercomputing Centre (Munich) for this purpose, our simulations of the ribosome take several weeks to months. Below, we will sketch some of the results we have obtained for the above questions.

(a) Translational stalling mechanism in the presence of the antibiotic erythromycin

Erythromycin is an antibiotic which binds inside the exit tunnel of bacterial ribosomes and thereby can reduce their efficiency or even block protein synthesis (stalling). One might think that the mechanism is simple: Like a cork in a bottle, the erythromycin molecule blocks the exit for the nascent peptide. However, it is not as simple: Stalling is highly sequence specific, and many sequences can pass the blockage and exit the tunnel, some without loss in efficiency. In contrast, several amino acids have been shown to be particularly vulnerable. For example, a lysine at position 11 (K11) of the ErmBL peptide causes severe stalling, for unknown reasons.

In collaboration with the *Protein Synthesis and Ribosome Structure* group of Daniel Wilson at the University of

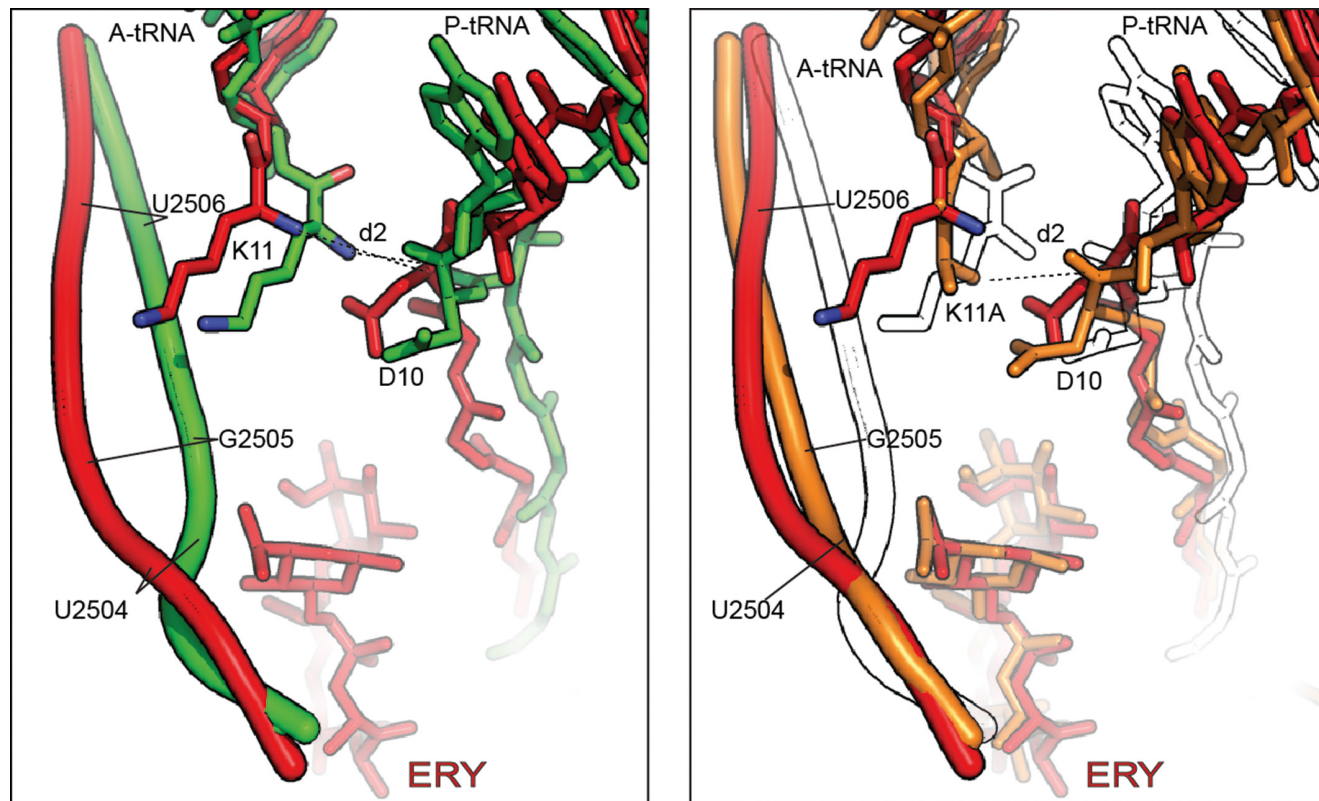


Fig. 2: Our simulations show that the antibiotic erythromycin (ERY) causes deformations of critical parts of the PTC that attaches the peptide to the growing nascent chain. Comparison of conformations obtained from MD simulations, A- and P-site tRNAs, as well as ERY are drawn as sticks and the backbone of ribosomal nucleotides (U2504-U2506) is shown in ribbon representation. The left panel compares conformations with ERY (red) and without (green). In the presence of ERY, the amino acid K11, which is attached to the A-site tRNA, moves away from amino acid D10 attached to the P-site. The right panel compares conformation with K11 mutated to alanine (orange), showing that the alanine approaches D10, thereby recovering the ability of peptide bond formation (Fig. adapted from [4]).

Hamburg, which resolved cryo-EM structures of the stalled complex, we studied the mechanism of the antibiotic-induced stalling [4] in more detail. To this aim, we simulated the complex in the presence of and after the computational removal of erythromycin, thereby complementing the cryo-EM experiments which cannot resolve the unstalled complex. In the simulations, erythromycin induces a conformational change in ribosomal nucleotides of the PTC. These negatively charged nucleotides are attracted to the positively charged amino acid K11 attached to the A-site tRNA. This attraction results in a shift of K11 away from the adjacent amino acid (D10) attached to the P-site tRNA, thus preventing peptide bond formation between the two (Fig. 2, left panel). Previously, it was also shown that a mutation of K11 to alanine prevented stalling. Indeed, when we induced this mutation also in our simulations, the uncharged alanine did not interact with the ribosomal nucleotides and, therefore, was not shifted away from the P-site tRNA (Fig. 2, right panel), thus explaining this so far puzzling experimental result. Further, the simulations predicted that a mutation of K11 to the so far untested amino acid arginine should enhance the stalling ability of ErmBL, which was subsequently confirmed by biochemical experiments [4].

(b) Rescue of stalled peptides by elongation factor EF-P

Also in the absence of antibiotics, the ribosome may run into problems. For example, if the ribosome synthesizes proteins

containing several specific amino acids – the prolines – in a row, the nanomachine is likely to stall due to the prolines' peculiar chemical properties. In bacteria, stalling is overcome by a specialized protein, the elongation factor EF-P, which contains a modified amino acid, K34. To decipher the mechanism of how EF-P alleviates stalling, we collaborated with the Wilson and Rodnina groups.

Using cryo-EM, Daniel Wilson's team managed to resolve structures of a ribosome stalled by a proline stretch both in the presence and absence of EF-P [5]. The structures with EF-P (black lines in Fig. 3) showed that the modified amino acid, with its finger-like modification (β -lys.Lys in Fig. 3), reaches into the CCA end of the P-site tRNA to which the nascent peptide is attached before peptide bond formation. The structures also show that the conformation adopted by the tRNA in presence of EF-P closely resembles the known conformation of a ribosome which is primed for peptide bond formation (grey lines in Fig. 3 – pre-attack conformation).

Our MD simulations revealed the effect of EF-P on the region around the PTC: In the presence of EF-P (green lines in Fig. 3), the P-site tRNA is stabilized in an "intact" conformation that allows peptide bond formation. Moreover, with unmodified EF-P (blue lines) or without EF-P (red lines), the P-site tRNA moves away from the amino acid attached to the A-site tRNA, thereby perturbing the conformation of the PTC machinery, which leads to stalling (Fig. 3) [5].

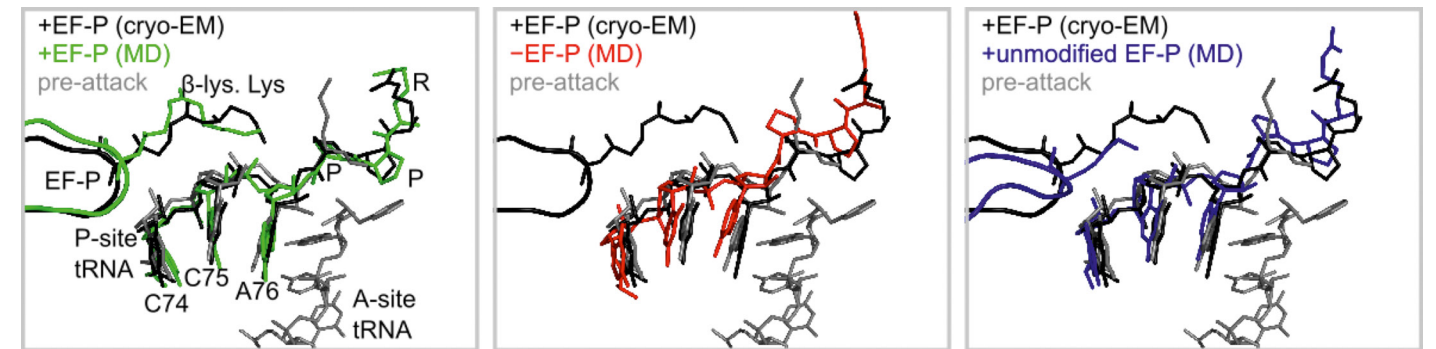


Fig. 3: Comparison of conformations obtained from MD simulations (colored) and cryo-EM (black). The modified lysine K34, CCA-tails of P- and A-site tRNAs, and the nascent peptide (PPR) are shown as sticks. In the MD simulation with EF-P (left panel, green), the conformation remains close to the cryo-EM structure. In the simulations without EF-P (center, red) and with unmodified EF-P (right, blue), the P-site tRNA moves away from the A-site tRNA, hindering the formation of a peptide bond between the A-site amino acid and P-site peptide (Fig. adapted from [5]).

(c) Peptide elongation through the exit tunnel

In an ongoing project, we are studying the structure and dynamics of growing nascent peptides in the ribosome exit tunnel. Since a peptide is quite flexible and is "pushed" at the PTC right within the ribosome's center all the way towards the outside, this task is similar to an attempt to push a cooked spaghetti through a narrow and winded channel – it is completely unclear how the ribosome accomplishes this feat.

To resolve this puzzle, we simulated this process and inserted one amino acid at a time to the P-site tRNA, thereby pushing the peptide through the tunnel. We studied three model peptide sequences, poly-phenylalanine (poly-Phe), poly-alanine (poly-Ala), and poly-glycine (poly-Gly). These sequences were also used in spectroscopy experiments by the Rodnina group, in which the peptides were labeled by a fluorescent dye (BOF), such that the precise sequence and timing of the extensions could be observed.

Our initial, only several microseconds long simulations underscored the "spaghetti problem" (Fig. 4, protein properly colored in yellow). We observed very slow relaxation of the poly-Phe peptide, such that the initial part of the tunnel was only able to accommodate about six amino acids. Interestingly, this obstacle to further translocation was sequence-specific: poly-Gly and poly-Ala peptides relaxed faster than poly-Phe, possibly due to their smaller sizes. In subsequent simulations, we were able to build a much larger peptide containing up to 16 amino acids from scratch. The pushing force generated during the first steps of amino acid addition in our simulations dissipated quickly and did not propagate to distances beyond a few amino acids. As a consequence, the peptide formed a compact fold already before entering a challenging part of the tunnel that is particularly narrow (Fig. 4, at the right side).

Already at this early stage of the project, it has become clear from our simulations that the initial pushing force exerted at the PTC does not suffice to explain the movement of the peptide further down the tunnel. Other effects, such as specific interactions between the growing peptide and the tunnel walls or entropic forces arising from the restricted thermal motion of the peptide in the tunnel, may mark the difference between nascent peptides and our cooked spaghetti.

References

- [1] Bock LV, Kolář M, Grubmüller H: Molecular simulations of the ribosome and associated translation factors. *Curr Opin Struct Biol* **49**, 27-35 (2018).
- [2] Bock LV, Blau C, Vaiana AC, Grubmüller H: Dynamic contact network between ribosomal subunits enables rapid large-scale rotation during spontaneous translocation. *Nucl Acids Res* **43**, 6747-6760 (2015).
- [3] Bock LV, Blau C, Schröder GF, Davydov II, Fischer N, Stark H, Rodnina MV, Vaiana AC, Grubmüller H: Energy barriers and driving forces in tRNA translocation through the ribosome. *Nat Struct Mol Biol* **20**, 1390-1396 (2013).
- [4] Arenz S, Bock LV, Graf M, Innis CA, Beckmann R, Grubmüller H, Vaiana AC, Wilson DN: A combined cryo-EM and molecular dynamics approach reveals the mechanism of ErmBL-mediated translation arrest. *Nat Commun* **7**, 12026 (2016).
- [5] Huter P, Arenz S, Bock LV, Graf M, Frister JO, Heuer A, Peil L, Starosta AL, Wohlgemuth I, Peske F, Nováček J, Berninghausen O, Grubmüller H, Tenson T, Beckmann R, Rodnina MV, Vaiana AC, Wilson DN: Structural basis for polyproline-mediated ribosome stalling and rescue by the translation elongation factor EF-P. *Mol Cell* **3**, 515-527 (2017).

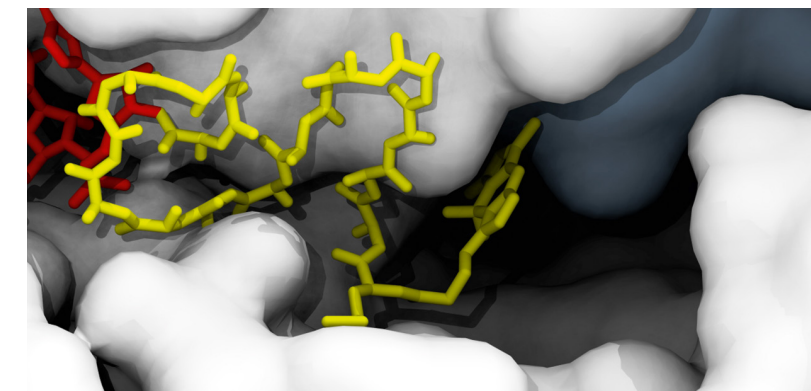
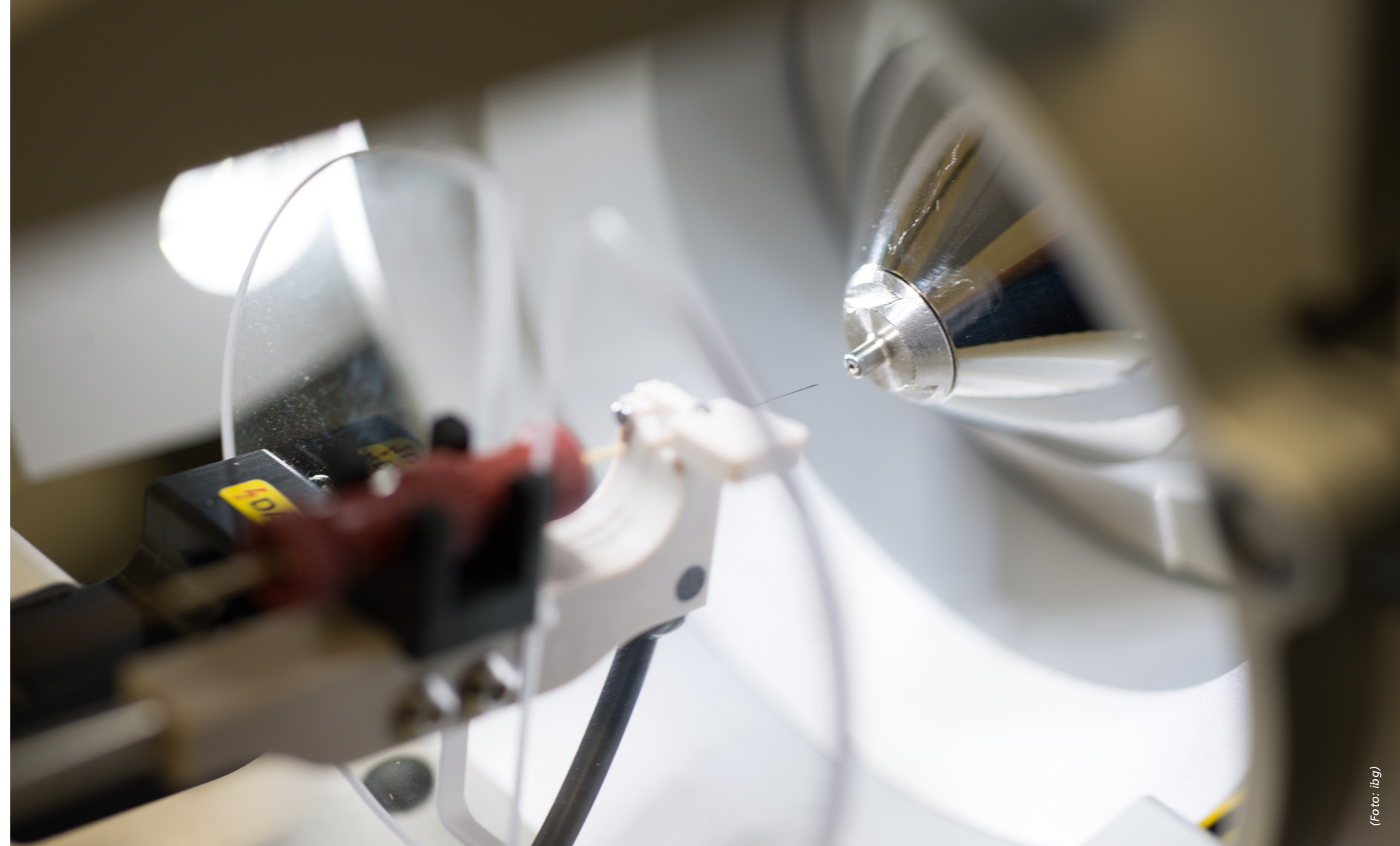


Fig. 4: The nascent poly-alanine peptide (yellow) with the fluorescent BOF dye attached at the right side initially forms a quite compact structure within the ribosome tunnel (grey surface). The P-site tRNA (red) "pushes" the nascent chain towards the right and the exit of the tunnel.

Proteine en masse

Die Facility für *Massenspektrometrie* ist eine der meistgenutzten zentralen wissenschaftlichen Einrichtungen des MPI-BPC. Hier untersucht der Biochemiker Henning Urlaub mit seinem Team, welche Proteine in biologischen Proben enthalten sind und analysiert ihre chemischen Eigenschaften. So unterstützt er zahlreiche Forschungsprojekte am Institut.



Schon der erste Eindruck lässt keinen Zweifel: Die Dienste der Facility für *Massenspektrometrie* sind enorm gefragt. In dem knapp 50 Quadratmeter großen Raum ist jede Nische genutzt – dort drängen sich zehn Massenspektrometer, äußerlich recht unscheinbare graue Kästen, über zierliche Schläuche mit kleinen Flaschen verbunden, die mit klaren, farblosen Flüssigkeiten gefüllt sind. Ein Blick auf die angeschlossenen Monitore zeigt, dass ein jedes Spektrometer in Betrieb ist und Proben misst, wenn es nicht gerade von einem Mitarbeiter neu bestückt wird. Wissenschaftlicher Service im Hochdurchsatz.

„Unsere Geräte sind komplett ausgelastet. Sie laufen fast 365 Tage im Jahr, nahezu 24 Stunden täglich. Jeden Freitag beladen wir sie für das Wochenende. Wenn gerade einmal nicht gemessen wird, sind wir mit Wartung oder Reparatur beschäftigt“, bestätigt Henning Urlaub. Er muss laut sprechen, um die Geräusche im Hintergrund zu übertönen – die Lüfter der Geräte führen einen akustischen Wettkampf mit der Klimaanlage an der Decke. Urlaub hat die Facility am MPI-BPC vor 18 Jahren aufgebaut und leitet sie auch heute noch als Teil seiner Forschungsgruppe *Bioanalytische Massenspektrometrie*. An die Anfänge kann er sich gut erinnern: „In der ersten Zeit waren wir nur zu zweit, meine Mitarbeiterin Monika Raabe und ich. Kurze Zeit später kam Uwe Plessmann aus der damaligen Abteilung *Biochemie*

und *Zellbiologie* von Klaus Weber zu Hilfe. Schnell wurde aber klar, dass die Arbeit auch zu dritt nicht zu schaffen ist.“ Inzwischen hat Urlaub fünf Mitarbeiter in der Facility: Monika Raabe und Annika Kühn organisieren das Labor, Uwe Plessmann betreut die Spektrometer, und zwei studentische Hilfskräfte sind für die Probenaufbereitung zuständig.

Doch was macht die Massenspektrometrie so wertvoll für die biologische Forschung? Urlaub hat eine bündige Antwort: „Mit Massenspektrometrie lässt sich die Masse von Atomen oder Molekülen messen. Auf biologische Fragestellungen angewandt bedeutet das, vereinfacht gesagt: Wir bestimmen die Identität und Menge von Proteinen. Für so ziemlich jede beliebige Art von Probe – sei es eine Lösung, ein Gewebe, eine Körperflüssigkeit – analysieren wir, welche und wie viele Proteine enthalten sind. ‚Proteomics‘ ist der wissenschaftliche Begriff dafür.“

Wir verlassen den Raum mit den Spektrometern, wo wir fühlbar im Weg stehen und sich die Mitarbeiter eng an uns vorbeischieben müssen. Neben an befindet sich das Labor, in dem das Facility-Team die Proben für die Massenspektrometrie vorbereitet. Auf einem Schüttler bewegen sich ein Dutzend viereckige, durchsichtige Gele in ihrer Pufferlösung in rhythmischen Kreisen. In den Gelen sind blaue Banden zu erkennen – angefärbte Proteine. Urlaub erläutert: „Jede Probe sollte zunächst ein solches Gel durchlaufen, aus zwei

Gründen: Das Gel entfernt Verunreinigungen und Salze, die bei der Messung stören würden. Und es trennt die Proteine nach ihrer Größe auf. So ergibt sich für jede Probe ein charakteristisches Bandenmuster.“

Aus den oft zahlreichen Banden des Gels wählen die Mitarbeiter der Facility jene aus, die für den Wissenschaftler interessanten Proteine enthalten, und bereiten sie für die Messung auf. Das bedeutet unter anderem: Die enthaltenen Proteine werden „verdaut“ – tatsächlich entspricht der Vorgang einem Teil unserer normalen Verdauung: Ein Enzym spaltet die Proteine in kleinere Fragmente, sogenannte Peptide, die leichter zu analysieren sind.

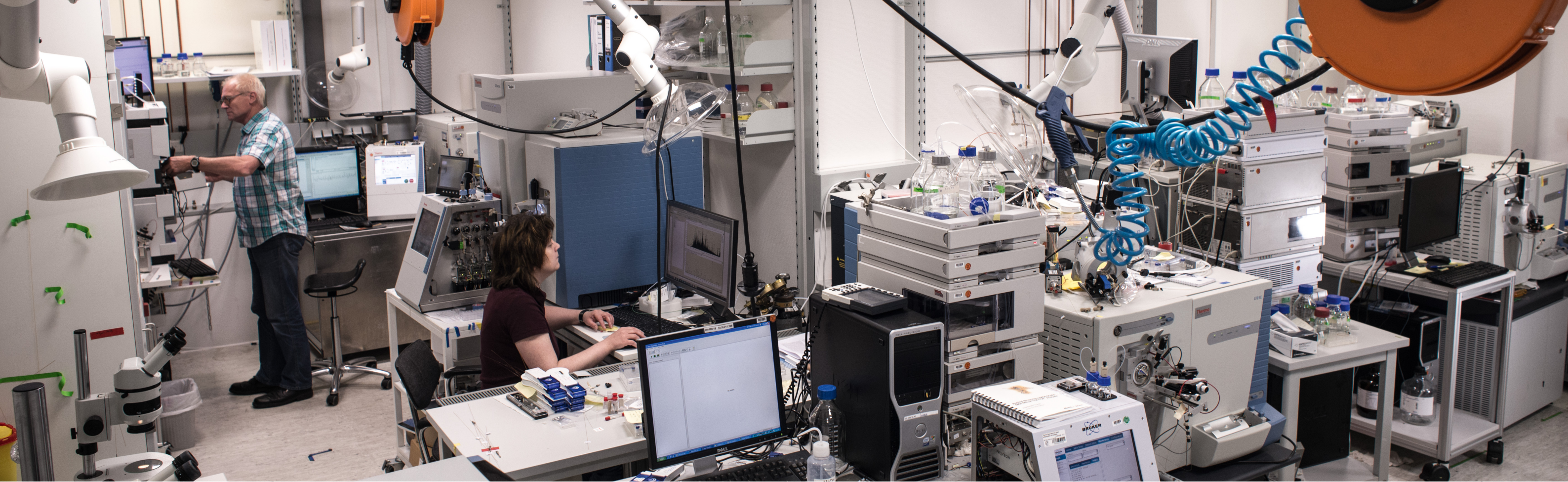
Schlüsselschritt Ionisierung

Anschließend geht es für die fertige Probe hinüber zu den Massenspektrometern. Vor der eigentlichen Messung muss die Peptidlösung allerdings ein etwa 30 Zentimeter langes Rohr passieren, das mit einem speziellen Kieselgel gefüllt ist: die Umkehrphasen-Chromatografie. Sie lässt wasserlösliche Proteinfragmente schneller passieren als wasserunlösliche, sodass sie vorsortiert ins Spektrometer kommen. Das verbessere das Messergebnis erheblich, sagt Urlaub.

Endlich am Spektrometer angekommen, erwartet die Peptide der für die Messung entscheidende Schritt: Sie werden elektrisch geladen, fachsprachlich *ionisiert*. Denn Massen-

spektrometrie funktioniert nur mit geladenen Molekülen. Für diese Ionisierung gibt es eine ganze Reihe unterschiedlicher Verfahren. Eines ist die sogenannte Elektrospray-Ionisation, kurz ESI, die sich für biologische Proben besonders gut eignet. „Lange Zeit war die massenspektrometrische Analyse von Proteinen und Peptiden fast unmöglich, da alle verfügbaren Methoden zur Ionisierung zu harsch waren und die Peptide kaputt gemacht haben. Das hat sich erst mit der Entwicklung von ESI geändert, die vergleichsweise sanft ist. In unserer Facility arbeiten fast alle Massenspektrometer mit dieser Ionisierungsmethode“, erzählt der Biochemiker. Er weist auf die zierliche Metallkapillare hin, die an jedem ESI-Massenspektrometer zu sehen ist: „Durch diese Kapillare wird die Peptidlösung geleitet. An ihrer Spitze ist eine Spannung angelegt. Und hier“, er zeigt auf eine winzige Rohröffnung nur fünf Millimeter von der Kapillarspitze entfernt, „befindet sich die Gegenelektrode. Treten die Peptide nun an der Spitze der Kapillare in das elektrische Feld ein, werden sie verdampft – man sagt vaporisiert – und zu elektrisch geladenen Ionen, die sich gegenseitig abstoßen und in Form eines Sprays auf die Gegenelektrode zufliegen.“

Durch die Öffnung in der Gegenelektrode gelangen die ionisierten Peptide in das unter Vakuum stehende Innere des Massenspektrometers. Was dann folgt, ist Physik für Fortgeschrittene und bei jedem Gerät etwas anders, je nachdem,



Uwe Plessmann (links) und Monika Raabe in der Facility für Massenspektrometrie. (Foto: ibg)

welche Art von Analysator und Detektor – die beiden entscheidenden Komponenten eines jeden Massenspektrometers – verbaut sind.

Urlaub erklärt es so: „Im Innern des Spektrometers trennt eine Kombination verschieden starker elektrischer Felder die Peptide nach ihrem Verhältnis von Masse zu Ladung.“ Auf diese Weise sortiert erreichen die Peptide am Ende ihres Weges durch das Spektrometer den Detektor, der sie zählt und für jedes einzelne Peptid das Masse-zu-Ladung-Verhältnis bestimmt. Die physikalische Einheit dafür ist das Thomson.

Doch der Thomson-Wert allein verrät den Forschern noch nicht, von welchem Protein ein Peptid stammt. Um das herauszufinden, müssen sie das Peptid erst noch sequenzieren: „Peptide bestehen aus einer Kette von Aminosäuren. Wir ermitteln, aus welcher Abfolge von Aminosäuren sich die Kette eines Peptids zusammensetzt. Diese Aminosäuresequenz ist für jedes Protein unverwechselbar. Kennen wir die Sequenz, kennen wir also das zugehörige Protein“, so Urlaub. Dazu filtert das Massenspektrometer mehrere Peptide eines Proteins heraus und zerlegt eines nach dem anderen in noch kleinere Bruchstücke, deren Masse es misst.

Das Ergebnis einer solchen Messung ist auf dem Monitor des Massenspektrometers zu sehen: ein sogenanntes Ionenpektrum, das die Peptid-Bruchstücke nach ihrer Größe sortiert abbildet. Die verschiedenen Bruchstücke unterscheiden sich dabei um die Masse einzelner Aminosäuren. Und da jede Aminosäure eine charakteristische Masse besitzt, lässt sich an der Masse der Bruchstücke die Sequenz des Proteins ablesen. Dieses Identifikationsverfahren nennt sich

massenspektrometrische Peptidsequenzierung. Computeralgorithmen gleichen die so ermittelten Proteinsequenzen mit einer Datenbank ab und identifizieren das Protein mit der besten Übereinstimmung. „Die Sequenz von zwei Peptiden ist meist ausreichend, um das entsprechende Protein aufzuspüren“, sagt Urlaub. „Voraussetzung ist allerdings, dass die Genomsequenz des Organismus bekannt ist, aus dem das Protein stammt.“

Für viele Genome ist das, wenn überhaupt, noch nicht lange der Fall – die vollständige Sequenzierung des menschlichen Genoms etwa wurde erst 2003 abgeschlossen. Seither hat die Massenspektrometrie rasant an Bedeutung für die biologische Forschung gewonnen.

Wichtige Informationsquelle für Strukturbologen

Die massenspektrometrische Analyse liefert für jede Probe genaue Zahlen, welches Protein in welcher Menge enthalten ist. Auf Wunsch kann die Facility noch weitere Analysen anbieten, etwa, ob Proteine eines bestimmten Signalwegs oder besondere Zellmarker besonders häufig vertreten sind. Manche Forscher nutzen die Massenspektrometrie auch, um chemische Veränderungen an Proteinen zu bestimmen. Weiter kann das Facility-Team ermitteln, ob ein Protein in verschiedenen Proben in unterschiedlichen Mengen enthalten ist.

In den letzten Jahren nutzen zunehmend Strukturbologen die Facility, um mehr über die Proteinkomplexe zu erfahren, deren Aufbau und Dynamik sie untersuchen: Welches Protein oder welche Nukleinsäure hat wo Kontakte zu einem anderen Molekül? Die Forscher setzen Chemikalien ein, die

stabile chemische Verbindungen zwischen Bereichen erzeugen, die in einem Molekülkomplex nah beieinanderliegen. Mithilfe der Massenspektrometrie lässt sich anschließend eindeutig bestimmen, welche Proteinbereiche das sind. Entsprechend ist Reinhard Lührmanns Abteilung *Zelluläre Biochemie*, die sich mit Struktur und Funktion des riesigen und besonders dynamischen Spleißosoms befasst, der mit Abstand beste „Kunde“ der Facility.

Trotz sorgfältiger Wartung fällt ab und zu ein Massenspektrometer aus. Meist ist der Grund eine verstopfte Chromatographiesäule. Manchmal streikt eine Pumpe oder es gibt ein elektrisches Problem. Bei diesen kleineren Zwischenfällen kommt dem Team zugute, dass es sich um fast alles selbst kümmert, von der Wartung bis zur Reparatur, wie Urlaub hervorhebt. „So sparen wir Geld und vermeiden lange Wartezeiten. Wir kennen unsere Spektrometer so gut, dass wir in der Regel direkt wissen, wo es hakt, und das Problem dann auch zügig beheben können.“

Die Facility am MPI-BPC gehört zu den größten Massenspektrometrie-Laboren in Deutschland. Theoretisch ließe sich die Kapazität der Einrichtung weiter erhöhen, indem zusätzliche Spektrometer angeschafft werden. Aber würden neue Geräte überhaupt noch Platz finden? „In diesem Raum sicher nicht“, bestätigt Urlaub. „Dabei ist nicht allein der Platz limitierend. Weitere Massenspektrometer würden schlicht das Stromnetz überlasten. Und die Klimatechnik wäre auch nicht mehr in der Lage, die von den Geräten erzeugte Wärme abzutransportieren.“ Die *Betriebstechnik* des Instituts hat sich schon allerhand einfallen lassen, um Elektrik und Lüftung an die besonderen Anforde-

rungen der Facility anzupassen. Sogar über ein eigenes Notstromaggregat verfügt die Einrichtung. Der Biochemiker weiß das zu schätzen: „Großes Lob an die Betriebstechniker! Die haben sich hier wirklich selbst übertroffen.“

Bis vor wenigen Jahren habe er auch Aufträge von der Universitätsmedizin Göttingen (UMG) – wo er seit 2010 eine Professur hält – und von anderen Göttinger Instituten angenommen, erzählt er. Aber die Nachfrage habe irgendwann die Kapazitäten der Facility überstiegen. Seit 2013 unterhält er daher im Institut für Klinische Chemie der UMG eine zweite, kleinere Facility unter der Leitung von Christof Lenz, die dort entsprechende Projekte in der biomedizinischen Forschung betreut. So steht die Facility am MPI-BPC heute in erster Linie den Forschern des Instituts zur Verfügung. Ausnahmen bilden Sonderforschungsbereiche, kooperierende Forschergruppen oder Drittmittelprojekte, an denen Urlaub beteiligt ist.

Von den verbleibenden Kapazitäten nutzt seine Gruppe etwa ein Drittel für die eigene Forschung. Im vergangenen Jahr haben zwölf weitere Labore des Instituts die Dienste der Facility in Anspruch genommen, das entspricht etwa einem Drittel aller Arbeitsgruppen. Auch die Zusammenarbeit mit neuen Gruppen wie *Quantitative und System-Biologie* von Juliane Liepe ist schon angelaufen. Für Urlaub ist das nur gut so: „Neue Labore und Projekte stellen uns immer wieder vor neue experimentelle Herausforderungen. So bleibt die Arbeit trotz aller notwendigen Routine herausfordernd und spannend.“ (fk)

Proteins en masse

The *Proteomics Facility* is among the most widely used units of scientific infrastructure at the MPI-BPC. Here, biochemist Henning Urlaub and his team investigate which proteins are contained in biological samples and analyze their chemical properties. In this way, they support many research projects at the institute.

Already the first impression leaves no doubt at all: The service of the *Proteomics Facility* is in high demand. In the room, less than 50 square meters in size, every niche is occupied – ten mass spectrometers are squeezed in. Inconspicuous in appearance, the grey boxes are connected by delicate plastic tubes to small bottles containing clear, colorless liquids. A glance at the monitors shows that every single spectrometer is in operation and testing samples, unless it is just being loaded by a staff member: scientific service in high throughput.

“Our spectrometers are running to capacity. They are busy almost 365 days a year, virtually 24 hours a day. Every Friday, we load for the weekend. When we are not testing, it is because of maintenance or repair,” Henning Urlaub confirms. He has to speak up to be heard against the background noise – the machines’ fans are competing to drown out the air conditioning overhead. Urlaub set up the facility at the MPI-BPC 18 years ago and still heads it today as part of his Research Group *Bioanalytical Mass Spectrometry*. He recalls the beginnings: “Initially, there were only two of us: Monika Raabe and myself. Soon we were joined by Uwe Plessmann, who came from Klaus Weber’s Department of *Biochemistry and Cell Biology*. However, even then, it quickly became clear that we could not cope with the workload.” Currently, Urlaub employs five people in the facility: Monika Raabe and Annika Kühn organize the lab, Uwe Plessmann looks after the spectrometers, and two student assistants prepare the samples.

But what makes mass spectrometry so valuable for biological research? The biochemist has a concise answer: “With

mass spectrometry we can measure the masses of atoms or molecules. Applied to biological problems, and put simply, that means: We determine the identity and the amounts of proteins. For virtually any kind of sample – a solution, a tissue, or a body fluid – we find out which proteins are in there and how much of each of them is present. Scientists call this research proteomics.”

We leave the room with the spectrometers, where we are in any case in the way of the staff, who continually have to push past us. In the lab next door, samples are being prepared for spectrometry. On a shaker, a dozen rectangular, transparent gels in buffer are rocking in rhythmic circles. Blue bands are visible in the gels – these are stained proteins. Urlaub explains: “Every sample should first go through a gel of this kind, for two reasons: First, the gel removes contaminants and salts that would disturb the measurement. Secondly, the gel separates proteins according to their size, so that every sample creates a unique pattern of bands.”

Key step ionization

From the – often very many – gel bands, the staff at the facility selects the ones containing the proteins that are of scientific interest. These are then prepared for measurement. One of the several steps in the preparation involves “digestion” of the proteins – this process is indeed similar to part of our normal digestion. An enzyme cuts the proteins into smaller fragments, so-called peptides. This simplifies analysis.

The prepared sample is then taken to a mass spectrometer. However, it is not inserted directly into the instrument, but

into a roughly 30-centimeter-long tube filled with a special silica gel: the reverse phase chromatography. It allows strongly water-soluble protein fragments to pass more quickly into the mass spectrometer than more poorly water-soluble ones, so that they reach the spectrometer pre-sorted. This dramatically improves the measurement’s quality, Urlaub says.

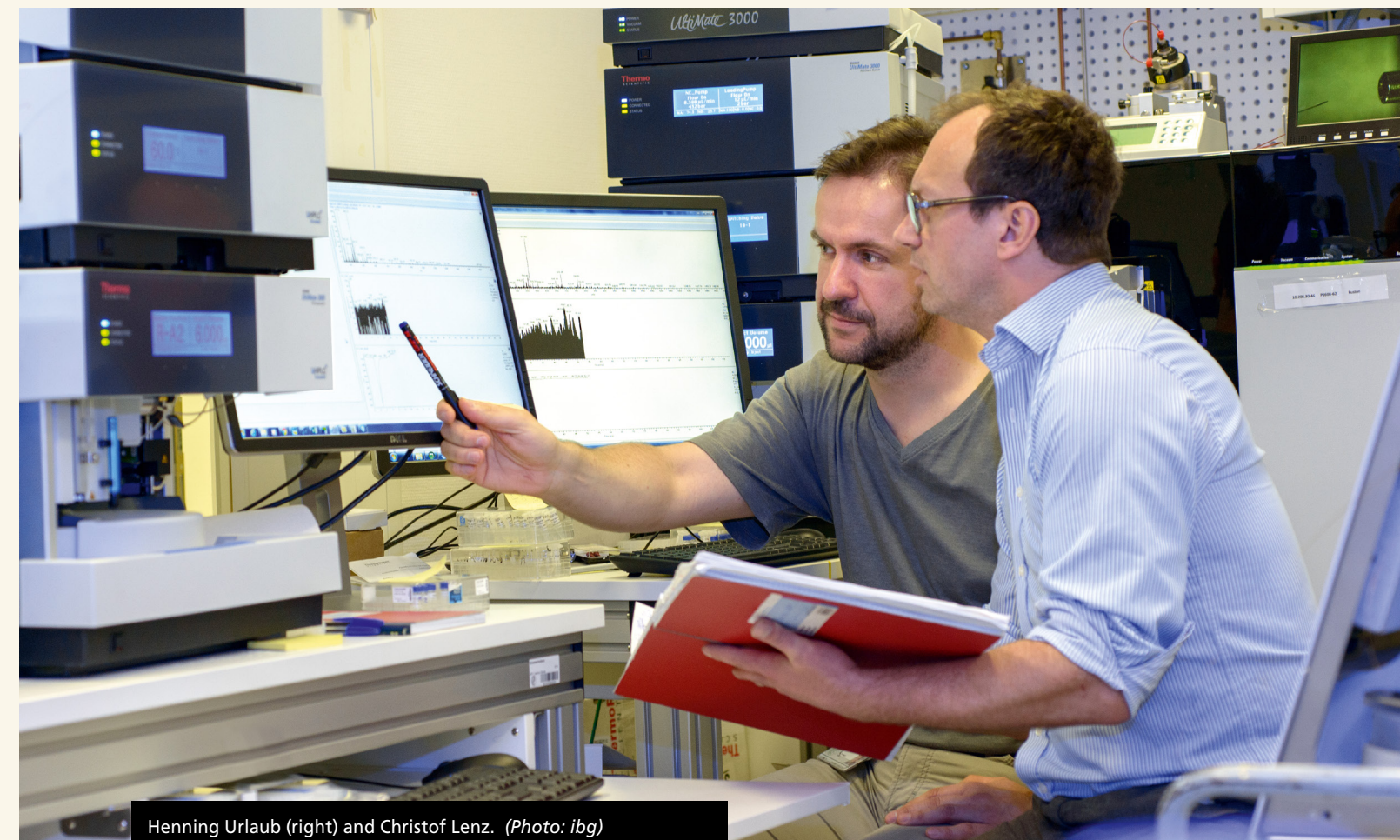
When the peptides eventually reach the spectrometer, the decisive step for measurement awaits them: They are charged electrically, *ionized* in technical language, as mass spectrometry requires charged molecules. For this ionization there is a number of techniques available. One of them is the so-called electrospray ionization, ESI for short, which is especially suitable for biological samples, as Urlaub relates: “For a long time, mass-spectrometric analysis of proteins and peptides was close to impossible as the ionization methods available were too harsh and destroyed the peptides. This only changed when ESI was developed, which is comparatively gentle. In our facility, almost all spectrometers use this ionization method.” He points out the delicate metal capillary mounted at the entrance to every ESI mass spectrometer: “The peptide solution passes through this capillary. At its tip, a voltage is applied. And here,” he indicates a tiny tube opening only five millimeters away from the capillary tip, “the counter-electrode is located. When the peptides enter the electric field at the tip of the capillary, they are vaporized and converted to electrically charged ions which repel each other and fly towards the counter-electrode as a spray.”

Through the opening in the counter-electrode, the ionized peptides reach the spectrometer’s interior, which is under vacuum. What follows is advanced physics and differs slightly from one instrument to another, depending on what kind of analyzer and detector – the two crucial parts of a mass spectrometer – the instrument is fitted with.

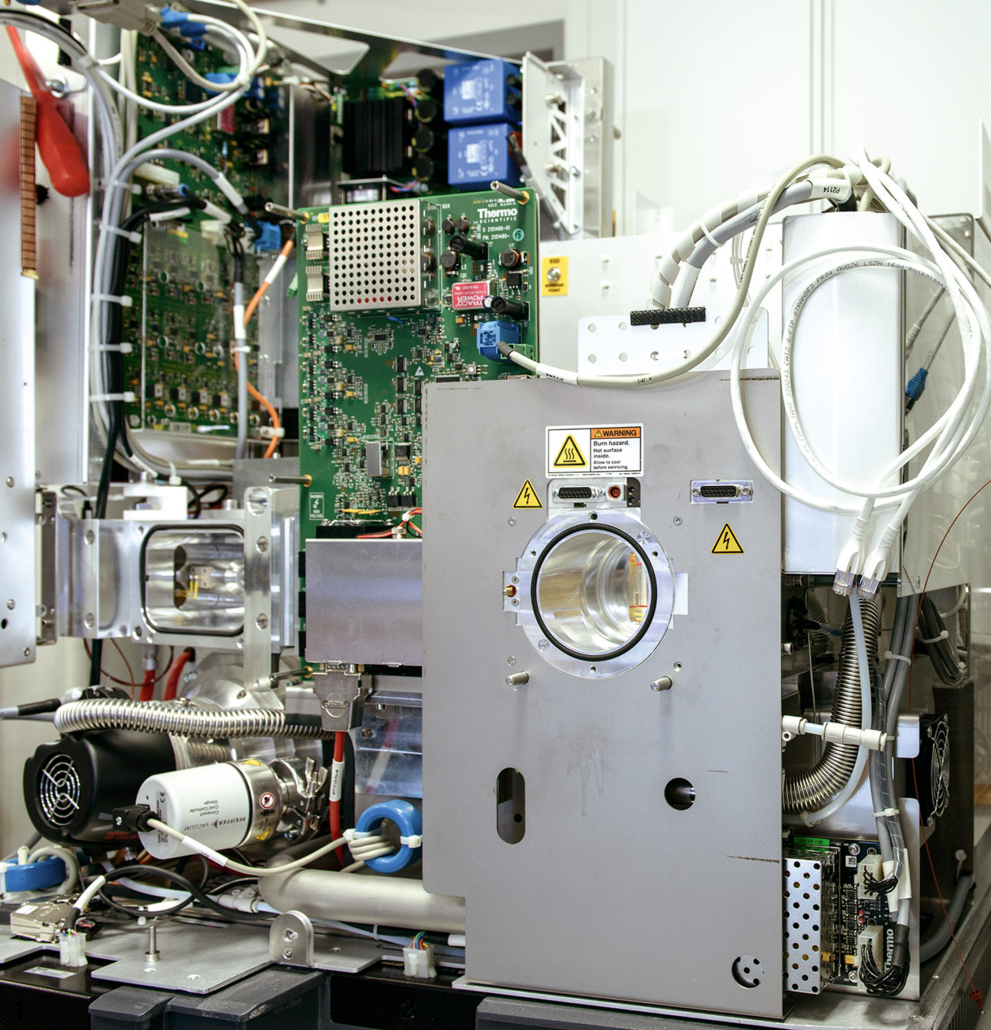
Urlaub puts it like this: “In the spectrometer’s interior a combination of different electric fields separates the peptides according to the ratio between their mass and their charge.” Thus sorted, at the end of their way through the spectrometer the peptides reach the detector, which counts them and determines the mass-to-charge ratio for every single peptide. The physical unit for this is the Thomson.

The Thomson value alone, however, does not tell the researchers from which protein a peptide comes. To find this out, the peptides need to be sequenced. “Every peptide consists of a chain of amino acids. We identify the amino acid sequence that forms the peptide chain. This sequence is unique for every protein. If we know the sequence, we also know the corresponding protein,” Urlaub says. To do this, the mass spectrometer filters out a number of peptides belonging to the same protein and breaks them down to even smaller fragments to measure their mass.

The result of such a measurement is displayed on the spectrometer’s monitor: a so-called ion spectrum that lists the peptide fragments sorted by size. The various fragments differ by the masses of single amino acids. And because every



Henning Urlaub (right) and Christof Lenz. (Photo: ibg)



Inner life of a mass spectrometer. (Photos: ibg)

bonds between regions lying close together within a molecular complex. Afterwards, mass spectrometry can unambiguously identify these regions. It comes as no surprise that Reinhard Lührmann's Department of *Cellular Biochemistry*, which investigates the structure and function of the huge and exceptionally dynamic spliceosome, is the facility's best "customer" by far.

Despite thorough maintenance, every now and then a mass spectrometer breaks down. In most cases the reason for this is a blocked chromatography column. Sometimes, a pump does not work or there is an electrical problem. The team has the technical know-how to cope unaided with these minor incidents, from maintenance to repair, as Urlaub emphasizes: "This saves us both money and time. We know our spectrometers very well and can usually identify immediately where the catch is and can solve the problem quickly."

The facility at the MPI-BPC is one of the biggest mass spectrometry labs in Germany. Theoretically, the group's capacities could be expanded by acquiring additional spectrometers. However, is there any space for new equipment? "Certainly not in this room," Urlaub confirms. "It is not only space that is limiting. Additional spectrometers would overload the electrical grid. And the air-conditioning would not be able to dissipate the heat." The institute's *Facility Management* had already conceived clever solutions to adapt electricity and ventilation to the facility's special needs. The group even has its own emergency power supply. Urlaub appreciates this: "A big thumbs-up to the *Facility Management*! They have really surpassed themselves there."

Until a few years ago, Urlaub's facility also performed tasks for the University Medical Center Göttingen (UMG) – where he has been a professor since 2010 – and for other Göttingen institutes. However, the time came when demand exceeded the facility's capacity. Therefore, in 2013 Urlaub established a second, smaller facility headed by Christof Lenz at the Institute for Clinical Chemistry at the UMG, which takes care of projects in biomedical research. Today, the facility at the MPI-BPC is available primarily to researchers at the institute. Exceptions are collaborative projects in which Urlaub participates. Of the remaining capacity, about a third is used by his group. In the past year, another twelve of the institute's laboratories have used the service of the facility – about a third of all groups there. Collaboration with new labs such as Juliane Liepe's *Quantitative and Systems Biology* has started. For Urlaub, this is a very good thing: "New labs and projects bring new challenges. Thus, in spite of its sometimes rather routine nature, the work remains exciting and fascinating." (fk)

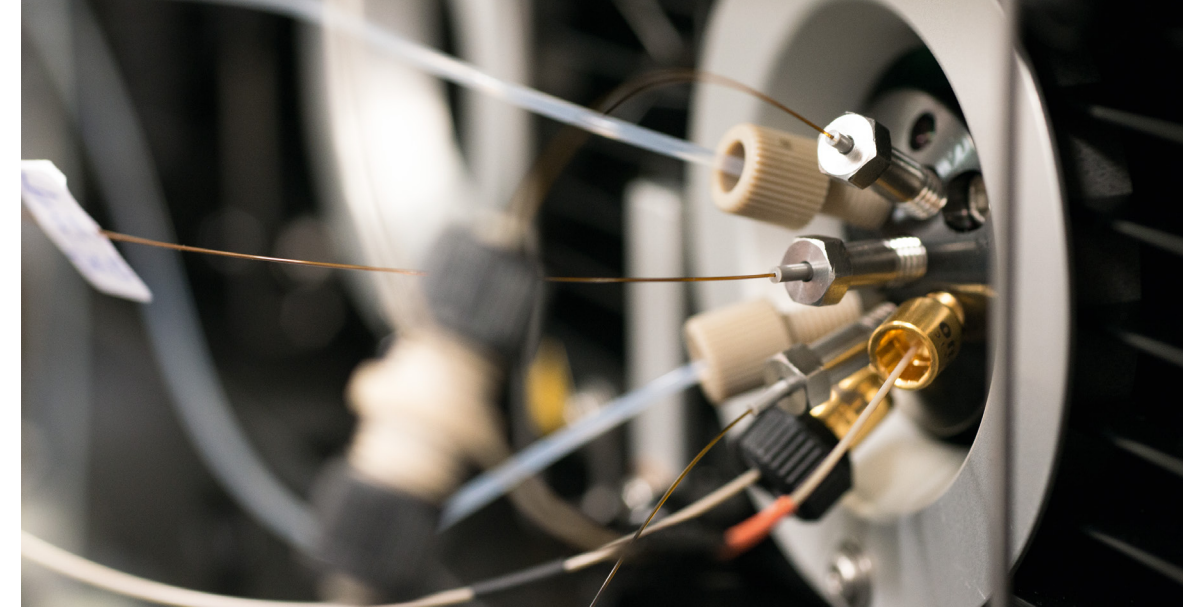
amino acid has a characteristic mass, the fragments' masses reveal the protein sequence. This identification method is called *mass-spectrometric peptide sequencing*. The protein sequences are compared against a database by computer algorithms to identify the proteins to which they are the most similar. "The sequence of two peptides is usually sufficient to track down the corresponding protein," Urlaub explains. "However, this does assume that the genome sequence of the organism from which the protein comes is known."

Many genomes have been sequenced completely, but by no means all – and, even then, only in the past ten to twenty years. The sequence of the human genome, for instance, has been known since 2003. In the intervening time, mass spectrometry has rapidly gained in importance.

Valuable source of information for structural biologists

For every sample, mass-spectrometric analysis yields precise numbers as to which proteins, and how much of each, are contained in the sample. If desired, the facility offers further analyses, such as determining whether the proteins of a certain signaling pathway, or particular cell markers, are enriched in a sample. Some researchers use mass spectrometry to investigate chemical modifications of proteins. Moreover, the facility team can find out whether the abundance of a protein varies between different samples.

In recent years, structural biologists have also increasingly used the facility. They want to learn more about the structure and dynamics of the protein complexes they investigate: Which protein or nucleic acid is in contact with which other molecule, and where? These scientists use chemical reagents to create stable chemical



Fünf Fragen

5 questions to Henning Urlaub

Was fasziniert Sie am meisten an Ihrer Arbeit?

Die Präzision.

What fascinates you most about your job?

The precision.

Was war der spannendste Moment Ihrer Karriere?

Jeden Tag aufs Neue: „Hat das Experiment geklappt?“

What was the most exciting moment in your career?

Every day anew: "Did the experiment work?"

Welche andere Tätigkeit könnten Sie sich vorstellen?

Zeichner und Maler.

If you had to choose a different profession, what would that be?

Draftsman and painter.

Welche Begabung hätten Sie gerne?

Auf den Fingern richtig laut pfeifen zu können.

Which talent would you like to have?

To be able to whistle loudly on my fingers.

Was würden Sie tun, wenn Sie mehr Zeit hätten?

Ein Lehrbuch über Massenspektrometrie schreiben.

What would you do if you had more time?

Write a textbook about mass spectrometry.





(Foto: ibg)

Woran können sich Wissenschaftler bei der ethischen Abwägung von Tierversuchen orientieren?

Zukünftig sollen sich Mitarbeiter an Max-Planck-Instituten, die direkt oder indirekt an Tierversuchen mitwirken, im Bereich Tierethik über Präsenzveranstaltungen und Online-Kurse verpflichtend weiterbilden. Eine der ersten Veranstaltungen der Max-Planck-Gesellschaft (MPG) hierzu findet am 23. April von 14 bis 16 Uhr am MPI-BPC statt. Den Hauptvortrag hält der renommierte Philosoph und Tierethiker Peter Kunzmann.

Die MPG betont in ihrer im letzten Jahr verabschiedeten Grundsatzerklärung (*White Paper*) zu Tierversuchen, dass diese unverzichtbar seien. Gleichzeitig bekennt sich die Forschungsgesellschaft zur besonderen Verantwortung der tierexperimentell arbeitenden Mitarbeiter und zu den ethischen Problemen, die speziell in der Grundlagenforschung mit Tierversuchen verbunden sind. Um diesen Bekenntnissen Rechnung zu tragen, hat die MPG zusätzlich zu den gesetzlichen Vorgaben eine Reihe von Maßnahmen beschlossen, mit denen der bestmögliche Kompromiss zwischen der Belastung von Versuchstieren und dem Erkenntniswert von Experimenten erreicht werden soll.

Nicht zuletzt ist dabei ein entscheidender Punkt, alle Mitarbeiter, die mit Versuchstieren umgehen, in Fragen der Tierethik zu schulen und weiterzubilden. Dafür sollen Online-Kurse möglichst mit Präsenzveranstaltungen kombiniert und für die betreffenden Mitarbeiter verpflichtend gemacht werden.

Diesen Ansatz erproben seit Anfang des Jahres einige Max-Planck-Institute in einem Pilotprojekt. Auch die Max-Planck-Institute für biophysikalische Chemie, für

Dynamik und Selbstorganisation und für Experimentelle Medizin wurden dafür ausgewählt. Am Montag, 23. April, findet von 14 bis 16 Uhr ein Tierethik-Seminar für alle mit Versuchstieren befassten Mitarbeiter und verantwortlichen Projektleiter am MPI-BPC im Manfred-Eigen-Saal statt. Darüber hinaus sind alle Interessierten herzlich willkommen.

Dieser englischsprachigen Veranstaltung vorangestellt ist ein Seminar in deutscher Sprache um 13 Uhr, das sich speziell an die Tierpfleger und technischen Assistenten aller drei Institute richtet. Der für das Tierethik-Programm verantwortliche Redakteur Peter Steiner aus der Abteilung *Kommunikation* der MPG wird dort nach einer kurzen thematischen Einführung das eigens für diese Berufsgruppe entwickelte *E-Learning*-Modul vorstellen.

Im anschließenden Tierethik-Seminar hält Peter Kunzmann, Professor an der *Stiftung Tierärztliche Hochschule Hannover*, einen Vortrag mit dem Titel *Animal Ethics*. Kunzmann leitet seit 2015 die Arbeitsgruppe *Ethik in der Tiermedizin* an der Hochschule und begleitet zukünftige Veterinäre, aber auch Wissenschaftler in der biomedizinischen Forschung zu Fragen wie: Gibt es eine ethische

Richtschnur für den Umgang mit Tieren im Tierversuch? Woran können Forscher sich orientieren? Peter Steiner wird im Anschluss das *E-Learning*-Programm für Wissenschaftler präsentieren. Zum Abschluss wird sich der neue Beauftragte für Tierversuche in der Grundlagenforschung der MPG, Andreas Lengeling, als Ansprechpartner für Fragen rund um das Thema Tierversuche vorstellen.

Verbesserungsvorschläge für dieses Fortbildungsformat sollen die Teilnehmer in einem Evaluationsbogen anmerken, der bei der Veranstaltung ausgeteilt wird. „Wir freuen uns auf aktives Feedback aus den Pilotinstituten, das uns hilft, die Tierethik-*E-Learning*-Programme optimal auf die Zielgruppen ‚Wissenschaftler‘ sowie ‚Tierpfleger und Technische Assistenten‘ zuzuschneiden“, so Steiner. Das Tierethik-Seminar und das erfolgreiche Bearbeiten des *E-Learning*-Programms werden als versuchstierkundliche Weiterbildung gewertet, zu der tierexperimentell arbeitende Mitarbeiter seit Einführung des neuen Tierschutzgesetzes 2013 gesetzlich verpflichtet sind. Die Mitarbeiter erhalten für die erfolgreiche Teilnahme jeweils ein Zertifikat. (cr)

Mehr zum Thema

Ein Interview mit Peter Kunzmann zum Thema *Ethik bei Tierversuchen* finden Sie unter www.tierversuche-verstehen.de/zur-ethik-von-tierversuchen

Das *White Paper* „Tierversuche in der Max-Planck-Gesellschaft“ finden Sie unter www.mpg.de/10882259/MPG_Whitepaper.pdf

Das Tierethik-E-Learning-Programm

der MPG hat sich an vorhandenen Materialien wie *LAS interactive* orientiert, das an der Universität Marburg entwickelt wurde. Es behandelt darüber hinaus in besonderer Weise den Tierversuch in der Grundlagenforschung und stellt wichtige Themenbereiche wie die Geschichte der Tierethik, das 3R-Konzept sowie weitere aktuelle Konzepte der Tierethik vor. Es wird in deutscher und englischer Sprache verfügbar sein.

Animal Ethics Seminar

April 23, 2018 – 2 to 4 pm



(Photo: ibg)

How can scientists orient themselves when ethically weighing up animal experiments?

In the future, employees at Max Planck Institutes who directly or indirectly participate in animal experiments will be required to undergo further education in the field of animal ethics via face-to-face lectures and online courses. One of the first events of the Max Planck Society (MPS) will take place on April 23 from 2 to 4 pm at the MPI-BPC. Keynote speaker is the renowned philosopher and animal ethicist Peter Kunzmann.

In its last year's White Paper *Animal Research in the Max Planck Society*, the research organization emphasizes that animal experiments are indispensable. At the same time, it professes to the special responsibility of employees working with laboratory animals and the ethical problems associated with animal experiments, particularly in basic research. In order to take account of these commitments, in addition to the legal requirements, the MPS adopted a series of measures aimed at achieving the best possible compromise between the potential harm inflicted on the animals and the anticipated benefits for scientific inquiry.

Last but not least, it is a crucial point to train and educate all employees who are involved in laboratory animal experiments in questions of animal ethics. For this purpose, the MPS has started to organize online courses combined with face-to-face lectures which shall be compulsory for the respective employees. Since beginning of this year, several Max Planck Institutes have been testing this approach in a pilot project. The Max Planck Institutes for Biophysical Chemistry, for

Dynamics and Self-Organization, and for Experimental Medicine were also selected as pilot institutes. They will host an animal ethics seminar on Monday, April 23, 2018, from 2 to 4 pm, in the Manfred Eigen Hall at the MPI-BPC for all institute members working with laboratory animals as well as responsible project leaders. But of course all employees interested are cordially invited to come, too.

This seminar in English on animal ethics is preceded by a short introduction into the topic in German at 1 pm aimed at animal caretakers and technical assistants of all three institutes. The editor Peter Steiner of the MPS' communication department, who is responsible for the animal ethics program, will also present the e-learning module specially developed for these professional groups.

In the following seminar on animal ethics, Peter Kunzmann, professor at the University of Veterinary Medicine Hannover, will give a lecture on *Animal Ethics*. Kunzmann has been heading the *Ethics in Veterinary* at the University since 2015 and advises future veterinarians as

well as scientists in biomedical research on questions such as: Is there an ethical guideline for dealing with animals in experiments? How can researchers orient themselves? Peter Steiner will then present the e-learning program for scientists, which will be available in German and English. Finally, the new MPS' Commissioner for Animal Experiments in Basic Research, Andreas Lengeling, will introduce himself as a contact person for questions related to animal experiments.

Participants are invited to suggest improvements of this training format via an evaluation form, which will be handed out at the event. "We look forward to receiving active feedback from the pilot institutes, which will help us to optimally tailor the animal ethics e-learning programs to the target groups 'scientists' as well as 'animal keepers and technical assistants'," Steiner says.

The animal ethics seminar and the successful complementation of the e-learning program are regarded as experimental animal training, to which animal experimental workers are legally obliged since introduction of the new Animal Welfare Act 2013. The employees will receive a certificate for successful participation in both parts. (cr)

More information

An interview with Peter Kunzmann on the topic *animal ethics* (in German) can be found at www.tierversuche-verstehen.de/zur-ethik-von-tierversuche

The White Paper *Animal Research in the Max Planck Society* can be found at www.mpg.de/10882259/MPG_Whitepaper.pdf

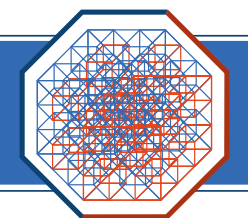
The animal ethics e-learning program

of the Max Planck Society has been based on existing materials such as *LAS interactive*, which was developed at the University of Marburg. However, in particular, it also deals with the animal experiment in basic research and presents important topics such as the history of animal ethics, the 3R concept, and further current concepts of animal ethics. The e-learning module will be available in German and English.



Prof. Dr. Peter Schuster
Department of Theoretical Chemistry
University of Vienna, Austria

MANFRED EIGEN
AWARD LECTURE



supported by



Bridging from Chemistry to Life Sciences – Evolution seen with the Glasses of a Physicist

Wednesday, May 9, 2018
3 pm
Manfred Eigen Hall



Max Planck Institute for
Biophysical Chemistry



„Mehrweg statt Müllberg!“

Die Pappbecher in der Kantine und Espresso-Bar am MPI-BPC haben ausgedient. Zum 1. Mai 2018 soll ein neues Pfandsystem mit Mehrwegbechern die Einwegvariante ersetzen.

Laut Deutscher Umwelthilfe landen jährlich rund 2,8 Milliarden *Coffee-to-go*-Becher in deutschen Abfalltonnen. Uwe Krüger, Betreiber der Kantine und Espresso-Bar am Max-Planck-Campus, will die Pappbecher dort nun komplett abschaffen: „Wir verkaufen täglich etwa 200 Kaffee- und Teegetränke. Die Anzahl an verbrauchten Einwegbechern ist bei uns unerklärlicherweise sogar doppelt so hoch. Dadurch entsteht am Institut viel vermeidbarer Müll – das wollen wir ändern.“

Abgelöst werden die Pappbecher von den wiederverwendbaren *Fair Cups*, die Schüler der Göttinger Berufsbildenden Schulen BBS II zusammen mit ihrer Lehrerin Sibylle Meyer konzipiert und unter dem Slogan „Mehrweg statt Müllberg!“ auf den Markt gebracht haben. Die *Fair Cups* sind aus Polypropylen, das etwa 500 Mal gespült und zu 100 Prozent recycelt werden kann.

Das neue Pfandsystem funktioniert simpel: Wer zukünftig ein Heißgetränk in der Kantine oder Espresso-Bar kauft, zahlt

zusätzlich 1,50 Euro Pfand – einen Euro für den Becher, 50 Cent für den Mehrwegdeckel. Das Pfandgeld erhält man zurück, sobald man den Becher bei einem *Fair Cup*-Partnerbetrieb zurückgibt. Deutschlandweit gibt es bereits über 200 Systempartner, die sich ganz einfach über die Handy-App *Fair-Cup* finden lassen, die derzeit jedoch nur im *Google Playstore* verfügbar ist. In Göttingen sind unter anderem die Bäckereien *Hermann, Küster, Ruch* und *Thiele* sowie die Läden *CONTIGO* und *Kaffee Concept* dabei.

Verbraucher können auch auf ihr Pfandgeld verzichten und es für soziale oder Fair Trade-Projekte spenden. Die Spenden werden gleichmäßig auf alle Projekte verteilt, die der gemeinnützige Förderverein *GFT-Erasmus e.V.* unter Vorsitz von Sibylle Meyer unterstützt. (ad)



Reusable cups to reduce garbage

The days of the paper cups in the canteen and Espresso Bar are numbered. From May 1, 2018, a new deposit system will replace the single-use variant.

According to the Environmental Action Germany, about 2.8 billion disposable cups end up in German garbage bins every year. Uwe Krüger, who runs the canteen and Espresso Bar at the Max Planck Campus, will now ban the paper cups there: “We sell about 200 coffees and teas every day. For some reason the number of one-way cups consumed here is even twice as high. As a result, avoidable garbage is produced at the institute – and we want to change this.”

The paper cups will be replaced by the reusable *Fair Cups*. They were designed by students of the *Göttingen Berufsbildende Schulen BBS II* and launched with the help of their teacher Sibylle Meyer. The cups are made of polypropylene, which can be rinsed about 500 times and is 100 percent recyclable.

The new deposit system is quite simple: If you buy a hot beverage in the canteen or Espresso Bar, you will have to pay additional 1.50 Euros deposit – one Euro for the cup, 50 Cents for the multi-way lid. You will get the deposit back when you return the *Fair Cup* at one of the distributing companies. Nationwide, there are more than 200 system partners. They can be easily found with the app *Fair-Cup* which is currently available in the *Google Playstore* only. Partners in Göttingen are, for example, the bakeries *Hermann, Küster, Ruch*, and *Thiele*, as well as the shops *CONTIGO* and *Kaffee Concept*.

Consumers have the option to renounce their deposit and donate it for social or fair trade projects. The donations are distributed equally among all projects supported by the charitable association *GFT-Erasmus e.V.* chaired by Sibylle Meyer. (ad)



Diesel-Fahrverbot auf dem Max-Planck-Campus

Ende Februar hat das Bundesverwaltungsgericht geurteilt, dass Städte Fahrverbote für Dieselaufos verhängen dürfen, um die Stickoxidbelastung zu senken. Auch am Göttinger Max-Planck-Campus gibt es Bedenken bezüglich der krankmachenden Gase. Damit die Luft dort sauber bleibt, sollen ältere Dieselfahrzeuge, die nicht der Euro-Norm 6d entsprechen, vom Gelände verbannt werden.

Stickoxide sind ätzende Gase, die die Schleimhäute angreifen und die Atemwege reizen. Beim Menschen können sie chronische Bronchitis, Asthma und Herz-Kreislauf-Erkrankungen auslösen und das Risiko für Allergien steigern. „Bereits geringe Stickoxid-Konzentrationen können schwere gesundheitliche Schäden verursachen, wenn Menschen ihnen über einen längeren Zeitraum ausgesetzt sind. Damit betrifft das Thema auch uns hier am Faßberg“, erklärt Heinz-Jürgen Dehne vom Betrieblichen Gesundheitsmanagement am MPI-BPC.

Um die Gesundheit ihrer Mitarbeiter zu schützen, haben die Geschäftsleitungen des MPI-BPC, des MPI für Dynamik und Selbstorganisation und der GWDG gemeinsam ein Fahrverbot für Dieselaufos auf dem Max-Planck-



Campus beschlossen, das am 1. August 2018 in Kraft tritt. Ab diesem Zeitpunkt darf das Gelände nur noch von Fahrzeugen mit einer entsprechenden Plakette befahren werden, die sie als „sauber“ ausweist. Plaketten erhalten alle Fahrzeuge, die von Benzin-, Gas- oder Elektromotoren angetrieben werden, sowie Dieselaufos, die die Abgasnorm Euro 6d erfüllen. Ausgenommen von dem Fahrverbot sind Handwerker, Liefer- und Baufahrzeuge. Besucher können für den Zeitraum ihres Aufenthalts eine Parkerlaubnis bei der Pforte erwerben. Es gibt bereits Überlegungen, das Fahrverbot in den kommenden Jahren auf alle Fahrzeuge mit Verbrennungsmotor auszuweiten – für einen abgasfreien Campus.

Weitere Informationen sowie den Antrag für die Plakette finden Sie unter intranet-goe.mpibpc.mpg.de/goe/car (ad)

Driving ban for diesel cars on the Max Planck Campus

End of February, the Federal Administrative Court judged that German cities may order driving bans for diesel cars to reduce the emission of nitrogen oxides. The Göttingen Max Planck Campus shares the concerns about the harmful gases. To keep the air clean, older diesel cars that do not fulfill the EU emission standard 6d will be banned from the site.

Nitrogen oxides are corrosive gases which attack mucosa and irritate the airway. In humans, they can cause bronchitis, asthma, as well as cardiovascular diseases and increase the risk for allergies. “Already low concentrations of nitrogen oxides can have harmful effects if people are exposed to them over a longer period. Thus, the issue also affects us up here on the Faßberg,” explains Heinz-Jürgen Dehne of the MPI-BPC’s Corporate Health Management.

To protect the employees, the Managements of the MPI-BPC, the MPI for Dynamics and Self-Organization, and the GWDG jointly decided on a driving ban for diesel cars on the Max Planck Campus, which will become effective on

August 1, 2018. As of this date, only vehicles with a sticker that identifies them as “clean” may enter the site. All vehicles driven by electricity, a gasoline or a gas engine, as well as diesel cars that fulfill the EU emission standard 6d will receive a sticker. Artisans, delivery and construction vehicles are excepted from the new regulation. Visitors can acquire a parking permission for the period of their visit at the gate. It is already considered to extend the driving ban to all vehicles with a combustion engine in the upcoming years – for an emission-free campus.

More information on the driving ban for diesel cars as well as the application form for the sticker may be found at intranet-goe.mpibpc.mpg.de/goe/car (ad)



Meister des Farbholzschnitts

Heiner Bauschert und der malerische Holzschnitt

- Eine Retrospektive zum 90. Geburtstag -

7.4. - 1.5.2018

im Foyer des MPI für biophys. Chemie
Am Faßberg 11,
Göttingen-Nikolausberg
Öffnungszeiten:
Mo-Fr 9-17 Uhr, Sa-So 10-16 Uhr

Ausstellungseröffnung am Samstag,
den 7. April 2018 um 16 Uhr

Einführung: Dr. Ulrich Nauber
Musikalische Umrahmung:
Thomas Bauschert, Gitarre

www.mpibpc.mpg.de/kunst-am-fassberg



Eine Ausstellungsreihe des Max-Planck-Instituts für biophysikalische Chemie



Mit **GitLab** stellt die GWDG einen Dienst zur Verfolgung von Änderungen zur Verfügung, die im Laufe der Zeit an einer Reihe von Dateien vorgenommen wurden. **GitLab** ist ein Versionsverwaltungssystem, das darüber hinaus weitere Funktionalitäten beinhaltet. Es ist primär dazu gedacht, Textdateien wie Quellcode, *LaTeX*-Dateien oder Skripte zu verwalten.

Ende Dezember 2017 wurde der *Sync&Share*-Dienst **GWDG ownCloud** auf Version 10.0.4 angehoben. Mit dem Upgrade wurden unter anderem drei wesentliche Neuerungen eingeführt: neue Gruppenfunktionen in Form sogenannter *Custom Groups*, flexiblere *Sharing*-Möglichkeiten sowie File-Integrität durch die verbesserte Kommunikation zwischen Server und Desktop-Client.

Norddeutsche Spitzenforscher können bald noch präzisere Modellrechnungen durchführen. Möglich macht dies ein 30 Millionen Euro teurer Supercomputer, der **HLRN-IV**, den der HLRN-Verbund beschafft. Die entsprechenden Kauf-

verträge wurden am 7. März 2018 in Göttingen und Berlin, den beiden Standorten des Hochleistungsrechners, unterzeichnet. Das neue System wird mit einer Gesamtleistung von 16 PetaFlop/s etwa sechsmal schneller sein als das bisherige und in zwei Phasen 2018 und 2019 an den beiden Betreiberstandorten installiert.

Spectre und **Meltdown** bedrohen unsere moderne IT-Infrastruktur. Die Lücken befinden sich praktisch in allen modernen Geräten auf Hardware-Ebene und untergraben die Abschottung von Informationen zwischen Nutzern, Programmen und dem Gerät. Insbesondere die Variante 2 der *Spectre*-Lücke ist nur schwer per Software zu beheben und kann deutliche Leistungsprobleme nach sich ziehen.

Weitere Informationen finden Sie in den GWDG-Nachrichten 3/2018. Alle Ausgaben der GWDG-Nachrichten finden Sie im WWW unter der URL www.gwdg.de/gwdg-nr

Thomas Otto

Nicolas Hotze

☎ 1038

IT & Elektronik Service

IMPRESSUM



Redaktionsleitung

Carmen Rotte (cr), Tel. 1304

Redaktion

Alina Dressler (ad), Tel. 1308

Frederik Köpper (fk), Tel. 1310

Carmen Rotte

Layout

Claus-Peter Adam, Tel. 1474

Hartmut Sebesse, Tel. 1580

Fotos

Irene Böttcher-Gajewski (ibg), Tel. 1135

Peter Goldmann (pg), Tel. 1423

Druck

Bonifatius GmbH, Paderborn

Max-Planck-Institut für
biophysikalische Chemie
Am Faßberg 11, 37077 Göttingen
Tel. +49 551 201-0
Fax +49 551 201-1222
www.mpibpc.mpg.de