

Wissenschaft und Journalismus: HITS bei den „Wissenswert“ in Heidelberg

Vom 30. Oktober bis 1. November 2024 fand erneut die größte Konferenz für Wissenschaftsjournalismus im deutschsprachigen Raum statt – die „Wissenswert“. Zum ersten Mal wurde die Veranstaltung in Heidelberg ausgetragen und zog mehr als 300 Teilnehmer*innen in die Hörsäle der Universität an. Auch dieses Jahr bot das Programm Podiumsdiskussionen, Vorträge und Workshops zu aktuellen journalistischen und wissenschaftlichen Themen.



Neben anderen in Heidelberg ansässigen Einrichtungen war das HITS mit einem Stand vertreten – eine gute Gelegenheit, das Institut im Dialog mit Wissenschaftsjournalist*innen vorzustellen. Besonders hervorzuheben war das neue Format Science Insight, mit Kurzvorträgen zu gegenwärtigen wissenschaftlichen Themen und Forschungen. Auch ein HITS-Kopf präsentierte hier seine Forschung. Unter dem Motto „Form follows Function: Machine Learning für Proteine nach Maß“ sprach der Physiker **Leif Seute** (Doktorand am HITS und Mitglied der Gruppe „Maschinelles Lernen und Künstliche

Intelligenz“ (MLI)) über das Thema Protein-Design und beleuchtete die faszinierende Welt der Proteine als Bausteine des Lebens. Er hat sich auf „geometrisches Deep Learning für Molekularbiologie“ spezialisiert. In seinem Vortrag zeigte er, wie durch computergestütztes Design von Proteinen mit spezifischen Funktionen neue Möglichkeiten für Medikamente, Impfstoffe oder Sensoren entstehen.



Via Data

Neuer HITS Blog Beitrag auf „Scilog“ zum Thema „Digital Baby Twins“ - Elaine Zaunseder (DMQ)
<https://scilogs.spektrum.de/via-data/doppel-leben-digital-baby-twins/>



HITS

Alexandros Stamatakis wieder Highly Cited Researcher



HITS-Gruppenleiter **Alexandros Stamatakis** (CME) zählt zum neunten Mal in Folge zu den weltweit meistzitierten Forschenden. Dies ergab die Untersuchung des US-Unter-

nehmens Clarivate Analytics. Ausgezeichnet werden Forscher*innen, deren Veröffentlichungen zu den besten 1% der Zitationen in ihrem Fachgebiet gehören. Die aktuelle Liste umfasst knapp 6.900 Forschende aus 59 Ländern. Da Stamatakis von der Europäischen Kommission einen ERA Chair erhielt, um die rechnergestützte Biodiversitätsforschung auf Kreta aufzubauen, ist er im Ranking mit der Erstzugehörigkeit (Affiliation) zur Foundation for Research & Technology – Hellas (FORTH) vertreten, in der Zweitaffiliation gehört er dem HITS an.

großer biologischer Datensätze spezialisiert, insbesondere auf molekulare Sequenzdaten. Seine Arbeit hat die Evolutionsbiologie entscheidend vorangebracht. Seit 2010 leitet er die Forschungsgruppe „Computational Molecular Evolution“ am HITS und ist seit 2012 ordentlicher Professor für High Performance Computing in Life Sciences am Karlsruher Institut für Technologie (KIT). Während der Laufzeit des ERA-Lehrstuhlprojekts bleibt er assoziierter Gruppenleiter am HITS und beurlaubter ordentlicher Professor am KIT, wo er seine Lehrtätigkeit fortsetzt.

Alexandros Stamatakis hat sich auf die Entwicklung von Software für die Analyse

Neue HITSters und Gäste

Postdocs:
Promovierende:
Masterstudent:
Wissenschaftlicher Mitarbeiter:
Zu Gast am HITS:

Beni Egressy (MLI), Georgios Lioutas (PSO), Kushal Singh (MCM)
 Torben Berndt (MLI), Catarina Corte-Real (AIN), Rimpa Pal (HITS-Stipendium, DMQ)
 Tobias van Lier (TOS)
 Arno Fricke (SDBV)
 Veronica Agaeva (PSO, Universität Heidelberg)

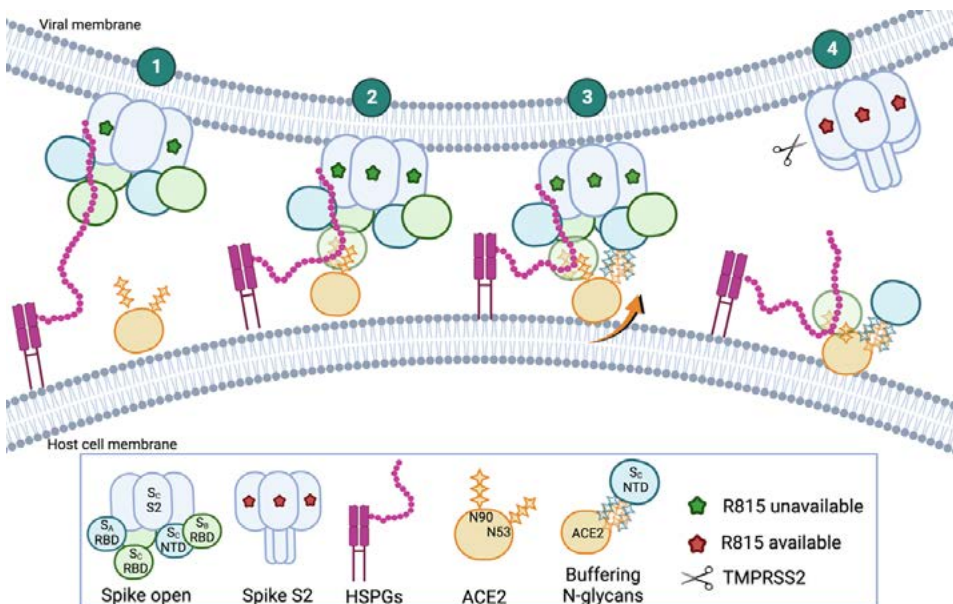
HITS Gruppen (12/2024): *Astroinformatics (AIN), Computational Molecular Evolution (CME), Computational Statistics (CST), Data Mining and Uncertainty Quantification (DMQ), Machine Learning and Artificial Intelligence (MLI), Molecular Biomechanics (MBM), Molecular and Cellular Modeling (MCM), Natural Language Processing (NLP), Physics of Stellar Objects (PSO), Scientific Databases and Visualization (SDBV), Stellar Evolution Theory (SET), Theory and Observations of Stars (TOS).*

HITSKöpfe

Polysaccharide als Mitspieler bei SARS-CoV-2 Infektionen

Ein internationales Forschungsteam des HITS und der Universität Heidelberg hat neue Erkenntnisse darüber veröffentlicht, wie bestimmte Polysaccharide als Mitspieler beim Infektionsmechanismus von SARS-CoV-2 agieren. Die Studie (Proceedings of the National Academy of Sciences USA (PNAS)) zeigt, welche entscheidende Rolle die individuellen Polysaccharide auf der Oberfläche der Wirtszellen (Heparansulfat) und auf dem Protein (N-Glykane) haben. Bisher ging man davon aus, dass diese Polysaccharide beim Ankoppeln der Spike-Proteine an den Wirtszellrezeptor ACE2 unterstützend mitwirkten. Ihre unterschiedlichen Ausprägungen in verschiedenen Zellen und Personen scheint jedoch die Anfälligkeit für das Virus zu beeinflussen.

„Wir wollten besser verstehen, wie Heparansulfate in den SARS-CoV-2-Infektionsmechanismus eingebunden sind und wie sie mit der Anfälligkeit der Wirtszellen zusammenhängen,“ erklärt HITS-Gruppenleiterin **Rebecca Wade**. Mithilfe molekularer Simulationen auf atomarer Ebene untersuchten die



Forscher*innen, wie Heparansulfat und N-Glykane die Wechselwirkung zwischen Spike und ACE2 verstärken. „Nur durch Simulationen konnten wir molekulare Details aufdecken und sehen, dass Heparansulfat und N-Glykane synergistisch den Spike/ACE2-Komplex stabilisieren,“ sagt **Giulia Paiardi**, Erstautorin der Studie.

Diese Erkenntnis ermöglicht neue therapeutische Ansätze zur Bekämpfung von SARS-CoV-2. „Wenn wir geeignete Heparansulfat-Mimetika entwickeln können, könnten wir das Ankoppeln und Eindringen des Virus in menschliche Zellen verhindern,“ fügt **Rebecca Wade** hinzu.

Forschung

Frauke Gräter: „Ich werde das HITS vermissen.“



Wie fühlt man sich, wenn man fast ein Drittel seines Lebens am HITS verbracht hat und es nun verlässt, um ein Max-Planck-Institut zu leiten? „Für mich ist es der richtige Schritt zur richtigen Zeit,“ sagt **Frauke Gräter**, „aber ich gehe mit einem weinenden Auge.“ Die Biophysikerin und langjährige Leiterin der Forschungsgruppe Molekulare Biomechanik tritt ab Januar 2025 ihre neue Stelle als Direktorin am Max-Planck-Institut für Polymerforschung in Mainz an. Vor gut 15 Jahren begegnete sie HITS-Gründer Klaus Tschira zum ersten Mal, im Vorstellungsgespräch für eine Gruppenleiterstelle bei EML Research, dem Vorgänger des HITS. Und sie war überrascht – von seiner Neugier, dem Wohlwollen und der Freude an der Wissenschaft. „Klaus Tschira bestätigte mich darin,

dass man Forschung aus Freude am Gegenstand betreiben kann und dass Grundlagenforschung essenziell für Erkenntnisgewinn ist.“ Gräter kam damals direkt aus Schanghai, wo sie eine Nachwuchsforschergruppe an einem Partnerinstitut der Max-Planck-Gesellschaft geleitet hatte. Zuvor hatte sie am MPI für Biophysikalische Chemie in Göttingen und an der Columbia University in New York gearbeitet. Dem ersten Gespräch, damals im Kaminzimmer der Villa Bosch, sollten weitere folgen, denn die neue Gruppe „Molekulare Biomechanics“ war ein wichtiger Baustein für das HITS, das Tschira wenige Monate später ins Leben rief. „Freiheit und Autonomie, seine Forschungsthemen selbst setzen – so empfand ich die Grundstimmung.“

Von Spinnenseide bis Kollagen: Volle Kraft für die Proteinforschung
 Frauke Gräter's Forschungsziel war und ist es zu verstehen, wie mechanische Kräfte biologische Prozesse, vor allem bei Proteinen, beeinflussen. Mit Arbeiten zur Struktur von Spinnenseide und zur Blutgerinnung gestaltete sie die Aufbaujahre des Instituts aktiv mit, erlebte das Wachstum von 5 auf 13 Gruppen und – nach dem Tod des Gründers 2015 – auch den Übergang und die Konsolidierung in nachhaltige und tragfähige Strukturen, die das Erbe des Stifters bewahren

und weiterentwickeln. Daran hatte sie als Wissenschaftliche Direktorin des HITS in den Jahren 2021 und 2022 maßgeblichen Anteil. Auch als Wissenschaftlerin war sie in dieser Phase erfolgreich: Sie erhielt 2017 den „PRACE Ada Lovelace Award“ und 2020 einen ERC Consolidator Grant für ihre Forschung zum Protein Kollagen, das dem Bindegewebe in Knochen, Bändern und Haut Stabilität verleiht. Sie baute gemeinsam mit Rebecca Wade – „eine tolle Kollegin“ – das SIMPLAIX-Projekt auf. Mit dem Institut verbindet sie auch persönliche Erinnerungen: „Das gute Essen und der wunderschöne Park, in dem wir nicht nur fachlich diskutiert, sondern auch einfach so zusammensitzen konnten – sogar im Winter bei Glühwein und Gitarrenmusik.“ „HITS hat ein super Potenzial,“ fasst Frauke Gräter zusammen. „Als relativ kleines, interdisziplinäres Institut ist es wie ein Schnellboot, das neue Forschungsrichtungen schnell aufnehmen und vorantreiben kann, auch Dank der Grundförderung durch die Stiftung.“ Was nimmt sie mit nach Mainz? „Sehr viel: die Offenheit für Kooperationen, die nicht alltäglich sind, den Sinn für offene Räume, die Kommunikation ermöglichen, und den Willen, Wissenschaft in die Öffentlichkeit zu tragen. Ich werde das HITS vermissen!“

Impressum | Dr. Peter Saueressig (V.i.S.d.P), saueressig@hits.org, Tel. +49 6221 533 245
 Fotos: HITS, Paiardi G. et al.

Beyond the limits



The Charts