



## Curriculum Vitae Hon.-Prof. Dr. Helmut Grubmüller



Foto: Irene Böttcher-Gajewski | MPI-NAT

**Name:** Helmut Grubmüller

**Geboren:** 31. Juli 1965

**Forschungsschwerpunkte:** Computergestützte molekulare Biophysik, Statistische Mechanik fern vom Gleichgewicht, theoretische Biophysik, Vielteilchensysteme, Hochleistungsrechnen

Helmut Grubmüller ist ein deutscher Biophysiker. Sein Forschungsschwerpunkt ist es, die Funktionsmechanismen biologischer Makromoleküle wie zum Beispiel Proteine oder Proteinkomplexe („biologische Nanomaschinen“) und deren Interaktion auf physikalischer Grundlage und atomarer Ebene zu verstehen. Dieses grundlegende Verständnis molekularer Lebensprozesse kann auch dazu beitragen, Krankheiten besser zu verstehen und zu bekämpfen.

### Akademischer und beruflicher Werdegang

- 2010 - 2011 Geschäftsführender Direktor, Max-Planck Institut für biophysikalische Chemie, Göttingen
- seit 2005 Honorarprofessor, Physik, Georg-August-Universität Göttingen
- seit 2003 Direktor und Wissenschaftliches Mitglied, Abteilung „Theoretische und Computergestützte Biophysik“, Max-Planck Institut für Multidisziplinäre Naturwissenschaften (vormals Max-Planck-Institut für biophysikalische Chemie), Göttingen
- 2003 Associate Professor, École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL), Schweiz
- 2002 Habilitation und Venia Legendi für Physik, Georg-August-Universität, Göttingen
- 1998 - 2003 Leiter, Forschungsgruppe „Theoretische und Molekulare Biophysik“, Max-Planck Institut für biophysikalische Chemie, Göttingen
- 1997 Postdoktorand, Institut für Molekulare Biologie und Biophysik, Eidgenössische Technische Hochschule (ETH) Zürich, Schweiz

- 1994 - 1998 Postdoktorand, Theoretische Biophysik, Ludwig-Maximilians-Universität (LMU) München
- 1994 Promotion, Lehrstuhl für Physik, Technische Universität (TU) München
- 1990 - 1991 Forschungsaufenthalt, Theoretische Biophysik, Beckmann Institute, University of Illinois at Urbana-Champaign, USA
- 1990 Diplom in Physik, TU München

### **Funktionen in wissenschaftlichen Gesellschaften und Gremien**

- 2019 - 2022 Vorsitzender, Vorstand, Deutsche Gesellschaft für Biophysik (DGfB)
- 2018 - 2021 Fakultätsmitglied, Max Planck Research School Matter to Life
- 2016 - 2019 Deutscher Vertreter im Wissenschaftsrat, Human Frontiers Science Program (HFSP)
- 2015 - 2017 Präsident, Europäische Vereinigung Biophysikalischer Gesellschaften (EBSA)
- 2015 - 2017 Leiter, Fachverband Biologische Physik, Deutsche Physikalische Gesellschaft (DPG)
- 2011 - 2020 Mitglied, Vorstand, Georg-August-Universität School of Science (GAUSS), Georg-August-Universität Göttingen
- 2008 - 2017 Mitglied, Sekretär und Stellvertretender Vorsitzender, Section Biological Physics, International Union of Pure and Applied Physics (IUPAP)
- seit 2008 Mitglied, Vorstand, Göttinger Graduate School for Neurosciences, Biophysics and Molecular Biosciences (GGNB), Georg-August-Universität Göttingen
- seit 2007 Mitglied, Vorstand, Europäische Vereinigung Biophysikalischer Gesellschaften (EBSA)
- 2007 - 2020 Sprecher, International Max Planck Research School for Physics of Biological and Complex Systems (PBCS), Göttingen
- seit 2005 Mitglied, Beirat, Fritz Haber Minerva Research Center for Molecular Dynamics, Hebrew University, Jerusalem, Israel
- 2004 - 2011 Gewähltes Mitglied, Gutachterausschuss, Basic Biological and Medical Research, Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG)

### **Projektkoordination, Mitgliedschaft in Verbundprojekten**

- seit 2022 „Transport of reaction intermediates in the stepwise assembly of fatty acids (TRISAFA)“, Marie Skłodowska-Curie Individual Fellowship, Europäische Kommission
- seit 2021 Teilprojekt, „Stochastic computed tomography: Theory and algorithms for single-shot X-FEL imaging“, Sonderforschungsbereich (SFB) 1456, DFG

- seit 2020 Projekt, Röntgen-Angström Cluster 2019 „Structural biology under biological conditions: Fluctuation correlation X-ray scattering (FXS) of proteins in solution“, Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF)
- seit 2019 Beteiligter Wissenschaftler, „Multiscale Bioimaging: From molecular machines to networks of excitable cells“, Exzellenzcluster (EXC) 2067, DFG
- 2009 - 2020 Teilprojekt, „Primary lipid vesicle fusion events: Pathways, forces, energetics“, SFB 803, DFG
- 2012 - 2018 Teilprojekt, „GromEx: Highly scalable unified long-range electrostatics and flexible ionization for realistic biomolecular simulation on the exascale“, Schwerpunktprogramm (SPP) 1648, DFG
- 2012 - 2018 Teilprojekt, „Structural studies of ribosome-SelB complexes and ribosome nascent chain folding intermediates by cryo-EM and molecular dynamics simulations“, Forschergruppe (FOR) 1805, DFG
- 2007 - 2019 Teilprojekt, „Nanoscale dynamics of proteins and their interaction“, SFB 755, DFG
- 2006 - 2009 Koordinator, Projekt „Nanomot – Synthetic biomimetic nanoengines“, Europäische Kommission
- 2004 - 2006 Human Frontier Science Program (HFSP)

### **Auszeichnungen und verliehene Mitgliedschaften**

- seit 2021 Mitglied, Nationale Akademie der Wissenschaften Leopoldina
- 2013 Rolf-Sammet Gastprofessur, Goethe-Universität Frankfurt am Main
- 1997 Stipendium, EMBO

### **Forschungsschwerpunkte**

Helmut Grubmüller ist ein deutscher Biophysiker. Sein Forschungsschwerpunkt ist es, die Funktionsmechanismen biologischer Makromoleküle wie zum Beispiel Proteine oder Proteinkomplexe („biologische Nanomaschinen“) und deren Interaktion auf physikalischer Grundlage und atomarer Ebene zu verstehen. Dieses grundlegende Verständnis molekularer Lebensprozesse kann auch dazu beitragen, Krankheiten besser zu verstehen und zu bekämpfen.

Mit dem Ziel, molekulare Lebensprozesse auf atomarer Grundlage und mit Hilfe fundamentaler physikalischer Gesetzmäßigkeiten zu verstehen, interessieren sich Grubmüller und sein Team insbesondere für die atomare Dynamik, molekulare Kräfte und Funktionsmechanismen von Proteinen und Protein-Komplexen. Beispiele hierfür sind spezifische Rezeptor/Ligand-Bindungen wie etwa die hochaffine Streptavidin/Biotin-Bindung; Selektivität und Effizienz von

Membrankanalproteinen etwa aus der Klasse der Aquaporine; die elektro-osmotisch/mechano/chemische Energieumwandlung in mitochondrialen ATP-Synthasen, die den „Treibstoff“ ATP in unserem Körper synthetisieren; Ribosomen, die durch Translation humaner Gene alle Proteine in den Zellen synthetisieren; Mikrotubuli als intrazelluläre „Transportschienen“ und Linearmotoren des Zellskeletts; sowie schließlich eine Reihe strukturell ungeordneter Proteine wie etwa das Krebs-assoziierte Signalprotein P53. Ebenso interessiert sich das Team für die Eigenschaften von Lipidmembranen und Membranfusion als zentralem Transportmechanismus.

Um die damit verbundenen Fragestellungen zu beantworten, verfolgt Helmut Grubmüller methodische Forschungslinien wie die Entwicklung effizienter und skalierbarer Algorithmen und Verfahren zur Molekulardynamiksimulation auf parallelen Höchstleistungsrechnern, die Entwicklung von Nichtgleichgewichtsmethoden der Statistischen Mechanik zur Berechnung thermodynamischer Potentiale sowie die Fortentwicklung und Anwendung Bayesischer Inferenzverfahren, etwa zur Strukturbestimmung mit Hilfe von Einzelmolekül-Ultrakurzzeit-Röntgenstreuexperimenten. Zum direkten Vergleich zwischen Theorie, Simulation und Experiment wie auch zur verbesserten Interpretation von Einzelmolekülexperimenten entwickeln Grubmüller und sein Team Verfahren zur direkten Simulation dieser Experimente, wie der atomaren Kraftspektroskopie oder der optischen Spektroskopie.