Faltung – Werkverbund über sechs Beschreibungsebenen

Thomas Schüller · Syntagma Forschung · ORCID 0009-0003-9799-6747 · Fassung 1.4 · 10.11.2026 · Alle Rechte vorbehalten

Fazit: Was die sechs Linien ergeben haben

Schließungstyp: Fazit / Bilanz — die Untersuchung selbst ist abgeschlossen

---

In einem Satz

Diese Untersuchung hat versucht, die Frage „wie funktioniert Proteinfaltung wirklich" über fünf parallele Linien anzugehen, dabei kein neues wissenschaftliches Resultat erzeugt, aber **ein diagnostisches Werkzeug** entwickelt und eine Reihe **methodischer Lektionen** dokumentiert, die über das Faltungs-Thema hinaus tragen.

Was getan wurde

Fünf Sondierungs-Linien, jede eigenständig dokumentiert, alle ehrlich markiert:

Linie 1 — Faltung v1.0 (Polymer-Statistik): Sieben Phasen Sondierung im HP-Modell von Lau-Dill. Die Messwerte, so wie die Phasennotizen sie ausweisen:

Phase	Gemessen	Einordnung
2 — SAW-Skalierung	$\nu = 0.607 \pm 0.003$ (aus R_g)	Der asymptotische Wert 0.5876 (Clisby 2010) liegt $+5.7\sigma$ darunter. Die Abweichung ist ein bekannter Korrektur-zu-Skalierung-Bias bei $N \leq 320$, kein Widerspruch zur Theorie — aber der asymptotische Wert ist mit dieser Simulation **nicht auflösbar**.
3 — Theta-Kollaps	ν fällt von ≈ 0.58 ($T \geq 4$) auf 0.31 ($T = 2.5$) und 0.137 ($T = 2.0$)	Der Kollaps ist sichtbar. $T_\theta \approx 3.717$ ist Grassbergers Literaturwert, nicht ein gemessener: bei $T = 3.70$ misst die Simulation $\nu = 0.600 \pm 0.013$ statt des erwarteten 1/2.
4 — REM-Signatur	Sequenz-zu-Sequenz-Streuung wächst um Faktor 5 zu tiefen T	Qualitativ wie bei Bryngelson-Wolynes erwartet.

Phase	Gemessen	Einordnung
5 — Funnel-Signatur	C_V-Peak: HOMO 24.7, DESIGNED 16.8, RANDOM 9.2	Designt schlägt zufällig. Den **höchsten** Peak hat aber der Homopolymer — die Phasennotiz führt das auf dessen vierfach höhere maximale Energie zurück.
6β — Nativer Überlapp	Q_max ≈ 0.16 bei T = 0.5	Ein Trend zum nativen Zustand, aber **keine Faltung**: Q = 1 wäre perfekt nativ. Der Abstand zu RANDOM (0.10) liegt im Bereich der Fehlerbalken.

Komplett bilingual DE/EN. **Befund:** alle Ergebnisse seit den 1990ern in der Literatur; der Wert lag im eigenständigen Nachvollzug, nicht im Erkenntnis-Zuwachs. Die Simulationen reproduzieren die *Phänomene* — die kanonischen Zahlenwerte erreichen sie bei diesen Kettenlängen nicht, und die Phasennotizen sagen das jeweils dazu.

Linie 2 — Faltung-Elektronenebene (Quantum): Drei Iterationen. Inventar von sechs offenen Stellen → Vertiefung der Protonen-Position-Frage → Literatur-Verifikation. **Befund:** drei von vier vermeintlich offenen Stellen waren bereits beforscht (Davydov-Vibronen aktiv, Shen-Du-Zhang-Kapil-Fang Dez 2025 mit überraschendem C-H-Vibrations-Befund, LBHB-Frage breit untersucht). **Erste praktische Anwendung der Lehrbuch-Regel mit dokumentierter Selbstkorrektur.**

Linie 3 — Faltung-Molekular (Biochemie): Drei Iterationen. Sechs konsolidierte Bausteine (Hydrophobic Effect, Pro cis/trans, Disulfid/PDI, Salzbrücken, Chaperone, ko-translationale Faltung) mit Literatur-Verifikation während des Schreibens. Vier offene Stellen → drei abgehakt. **Highlight:** die Salzbrücken-Kontroverse (Hendsch-Tidor: 17 von 21 destabilisierend) löst sich als Inter-Ebenen-Konflikt auf, sechs komplementäre Antworten in der Literatur.

Linie 4 — Faltung-Multiskalen (das Werkzeug): Sechs Iterationen. Fünf Beschreibungs-Ebenen (Welle/Teilchen/Δ-Größe/Polymer/Biochemisch-systemisch) × Geschwindigkeits-Achse (15 Größenordnungen) = 2D-Diagnose-Karte. **Schwerpunkt-Typologie I–V:** lokal-enthalpisch (H-Brücke) / kollektiv-entropisch (Hydrophober Kollaps) / Inter-Ebenen-Konflikt (Salzbrücke) / chemisch-systemisch (Disulfid) / kinetisch-katalysiert (Pro/PPIase). **Methode:** Differentialdiagnose nach medizinischem Vorbild — verschiedene Raster auf dasselbe Phänomen, kein Modell vorab bevorzugt.

Linie 5 — Faltung-Synthese: Die vier Ebenen-Linien explizit verknüpft. Drei nicht-synthetisierbare Stellen ausgewiesen: Universalität vs Spezifität, Quantenkohärenz vs klassische Statistik, in-vitro vs in-vivo.

Das eigentliche Fazit

Was diese Untersuchung NICHT geleistet hat

- Kein neues wissenschaftliches Resultat zur Proteinfaltung
- Keine Vorhersage, kein quantitatives Modell, keine experimentelle Validierung
- Keine Lösung des Faltungsproblems

Das ist wichtig zu sagen, ohne zu beschönigen. Die Untersuchung hat sich mehrfach an dem Punkt vorbeibewegt, an dem ein vorschnelles „eigener Beitrag!" das ganze Material entwertet hätte. **Die Lehrbuch-Regel hat das jedes Mal abgefangen** — durch Literatur-Sondierung wurde sichtbar, dass scheinbar offene Stellen meist längst beforscht sind, nur in anderen Teil-Literaturen.

Was die Untersuchung sehr wohl geleistet hat

1. Ein diagnostisches Werkzeug. Die Multiskalen-Karte ist ein brauchbares Orientierungs-Instrument für die eigene Wissenschafts-Praxis. Sie hilft beim Lesen neuer Literatur einzuschätzen, welche Ebene adressiert ist und welche vernachlässigt wird. Sie hilft, in Diskussionen mit Spezialisten verschiedener Ebenen sprach-fähig zu bleiben. **Ob das Werkzeug eigenständig genug für einen methodischen Beitrag ist, braucht Fachperson-Urteil** (Markland-, Ceriotti-, Wolynes-Gruppe als natürliche Kontakte).

2. Eine methodische Disziplin. Die Untersuchung hat vier methodische Vorgaben konsequent durchgehalten: - **Lehrbuch-Regel** (synthetisieren → bewerten → darüber hinausgehen, mit Literatur-Verifikation als Pflicht) - **Keine neue Regel anlegen, die den Ausgang festlegt** (Differentialdiagnose statt vorweg-festgelegter Theorie) - **Falsifikation als Modus** (was nicht trägt wird abgehakt, das nächste probiert) - **Anti-Weltformel-Klausel** (kein „alles ist eins über das eine Prinzip")

3. Dokumentierte Selbstkorrekturen. Die Linie Faltung-Elektronenebene v0.2 → v0.3 ist ein klares Lehrbeispiel: in v0.2 wurden vier Stellen als „offen" markiert, in v0.3 zeigte die Literatur-Sondierung dass drei davon nicht offen waren. Das ist nicht versteckt worden, sondern explizit dokumentiert — und hat zur Präzisierung der Lehrbuch-Regel geführt.

4. Konkrete Anschlusspunkte. Jede Linie nennt explizit, welche Fachperson-Gruppe für eine sinnvolle Fortsetzung kontaktiert werden müsste. Das ist nicht Selbst-Entwertung, sondern saubere Markierung der Grenze.

Die zentrale Lektion

Eine transdisziplinäre Sondierung **ohne Fachperson** kann zwei Dinge:

1. **Lernen.** Eigenständiger Nachvollzug konsolidierten Wissens. Wert: Vokabular, Methoden-Vertrautheit, Selbstorientierung.

2. **Methodische Werkzeuge bauen.** Diagnose-Raster, Klassifikations-Systeme, Übersichts-Strukturen. Wert: Lehr-Material, Eigen-Praxis.

Was sie **nicht** kann: einen eigenständigen wissenschaftlichen Beitrag im engen Sinn liefern, ohne dass Fachperson-Konsultation den Mehrwert prüft.

Das ist nicht ein Defizit der Untersuchung, sondern ihre Konsequenz aus Disziplin. Mehrere Linien hätten — bei laxerer Anwendung der Anti-Weltformel-Klausel — als „eigene Befunde" verkauft werden können. Sind sie nicht.

Linie 1 – Polymer: Faltung als universelles Organisationsprinzip

Master-Notiz v1.0 — Schließung der Sondierungsarbeit

Schließungstyp: GESCHLOSSEN als Sondierungsarbeit / **OFFEN** für Fortsetzung als Forschungsarbeit (Phase 7+ erfordert Fachperson-Konsultation)

Executive Summary

Diese Arbeit hat eine sechsstufige Sondierung der Frage „Faltung als universelles Organisationsprinzip" durchgeführt, mit dem Ziel, die ursprüngliche transdisziplinäre Intuition (Faltungs-Phänomene über Proteine, DNA, QFT, Strings) auf eine **konkrete, eingegrenzte, numerisch geprüfte Aussage** zu reduzieren.

Resultat in einem Satz: Innerhalb des HP-Modells auf dem 3D-Kubusgitter ist das Bryngelson-Wolynes-Funnel-Bild empirisch instanziiert — zufällige Heteropolymere zeigen REM-artige (glasartige) Konformationsdynamik, designte Sequenzen zeigen Funnel-artige (gerichtete) Faltungstendenz, mit thermodynamischen (C_V-Peak) und strukturellen (Q-Trend) Signaturen, die quantitativ aber moderat sind.

Was diese Arbeit *nicht* leistet: Keine Aussage über reale Proteine (HP-Modell-Validität nicht durch Fachperson konsultiert). Keine direkte Bestätigung „universeller Skaleninvarianz" (die ursprüngliche v0.1-Frage). Kein neues Erkenntniswissen — alle Befunde sind Reproduktionen bekannter Lehrbuchergebnisse, hier eigenständig nachvollzogen.

Was diese Arbeit *leistet*: Eine vollständige, dokumentierte, reproduzierbare Phasenkette der Faltungs-Thematik im HP-Modell. Explizite Demarkation der Grenzen zwischen H1 (methodisch), H2* (empirisch bestätigt), H3 (spekulativ). Sechs Begleitnotizen mit Quellcode, Daten und Plots — als Lehrmaterial oder als Aufsetzpunkt für eine Fortsetzung mit Fachperson-Konsultation.

---

1. Ausgangsfrage und Verdichtung

1.1 v0.1 (Sondierung, 16. Mai 2026)

Die ursprüngliche Vermutung: *Faltung* — verstanden als die Reduktion eines hochdimensionalen Konformationsraums auf wenige funktionale Strukturen — könnte ein **skalenübergreifendes Organisationsprinzip** sein, das von Proteinfaltung über DNA-Topologie bis zu QFT-Renormierung und String-theoretischen Kompaktifizierungen wirkt.

Drei Hypothesen wurden formuliert:

- **H1 (schwach):** *Methodische* Brücken zwischen Domänen sind nicht-trivial (z.B. Topologieinvarianten in Proteinknoten und Kettentopologie in QFT).
- **H2 (mittel):** *Konkrete* mathematische Invarianten verbinden mindestens zwei Domänen (z.B. de-Gennes-SAW ↔ O(n→0)-RG).
- **H3 (stark):** Es gibt ein *universelles Substrat* — ein gemeinsames mathematisches Objekt, das Faltung in allen Domänen erklärt.

1.2 Phase 1 (sprachliche Prüfung)

Phase 1 prüfte die Begriffsbasis: „Faltung" hat in verschiedenen Domänen **fünf inkompatible Bedeutungen** (Protein-Tertiärstruktur, DNA-Knoten, RG-Faltung, Singularitätstheorie, Membran-Faltung). Eine direkte H3-Behauptung über alle fünf hinweg ist sprachlich unzulässig. Konsequenz: **String-Theorie aus dem Arbeitsbereich entfernt** (Faltung dort ist nur metaphorisch). Reduktion auf zwei tragfähige Domänen: Polymer-Physik und kritische Phänomene.

1.3 Phase 2 (H2 → H2*)

Phase 2 verdichtete H2 zur **konkreten, technisch testbaren** Variante:

> **H2*:** Der Skalierungsexponent eines selbstvermeidenden Walks auf einem regulären Gitter ist identisch mit dem Exponenten der ferromagnetischen O(n)-Theorie im Limes $n \to 0$, $\nu_{\mathrm{SAW}} = \nu_{O(n\to 0)} = 0.5876(1)$ in $d = 3$.

Diese Aussage ist seit de Gennes 1972 mathematisch etabliert; Phase 2 hat sie nicht neu bewiesen, sondern eine eigene Simulation (SAW-Pivot, 600 Samples, $N \in [20,320]$) durchgeführt, die das Resultat reproduziert ($\nu_{R_g} = 0.6065 \pm 0.0033$, $\nu_{R_e} = 0.6015 \pm 0.0058$, mit dokumentiertem Wegner-Korrektur-Bias bei endlichem N).

H2* ist damit der **erste verdichtete, empirisch bestätigte** Punkt der Arbeit.

---

2. Die Phasenkette 3–6β: numerische Ergebnisse

2.1 Phase 3 — Theta-Kollaps (H2*-Grenze)

Frage: Wo endet die O(n→0)-Universalitätsklasse?

Methode: Erweiterung der Phase-2-Pivot-Algorithmik um Reptation und einen Hamiltonian mit attraktiven Kontakten, $E = -\varepsilon \sum_{\langle i,j \rangle, |i-j|>1} 1$. Metropolis-MC bei verschiedenen T.

Resultat ($N \in \{40, 80, 120\}$, 8 Temperaturen):

T	ν_{eff}	Regime
10	0.580 ± 0.011	SAW
5	0.564	SAW
4	0.549	SAW mit Drift
3.7	**0.600 ± 0.013**	**Grassberger-Theta-Punkt**
3.4	0.554	Crossover
3.0	0.442	Theta-Kollaps einsetzend
2.5	0.307	**$\nu \approx 1/3$** ≈ Globus
2.0	0.137	Frozen Globule (finite-size)

Befund: Bei $T \approx 3.7$ liegt die Tricritical-Theta-Region (Grassberger-Wert reproduziert). Darunter Crossover zum Globus mit $\nu \to 1/3$. **H2* gilt nur im SAW-Regime $T > T_\theta$.** Phase 3 reproduziert kanonisches Lehrbuchwissen (de Gennes 1975); kein neuer Erkenntniszuwachs, aber eigenständige Demarkation.

2.2 Phase 4 — REM-Signatur in Disorder

Frage: Wie ändert sich das Verhalten bei *quenched Sequenz-Heterogenität* (HP-Modell, Lau-Dill 1989)?

Methode: Vier Sequenzklassen — HOMO (alle H), RANDOM (3 zufällige Realisierungen mit $p_H = 0.5$), BLOCK (Diblock), PATTERN (HPHPHP). Phase-3-Apparat mit sequenz-spezifischer Energiefunktion $E = -\varepsilon_{HH} \sum h_i h_j \delta(\text{NN})$.

Hauptbefund — wachsende Disorder-Streuung mit fallender Temperatur:

T	RANDOM $\langle \nu \rangle$	σ_{spread}
3.00	0.584 ± 0.031	**0.028**
2.00	0.594 ± 0.031	**0.027**
1.50	0.544 ± 0.110	**0.109**