

## Pressemitteilung

Mülheim an der Ruhr, 26.01.2015

### Wasserstoffumsetzung durch das Enzym „Hydrogenase“

Forscher des Max-Planck-Institutes für Chemische Energiekonversion berichten in *NATURE* über eine neue ultrahoch aufgelöste Kristallstruktur des katalytisch aktiven Zustandes der [NiFe]-Hydrogenase.

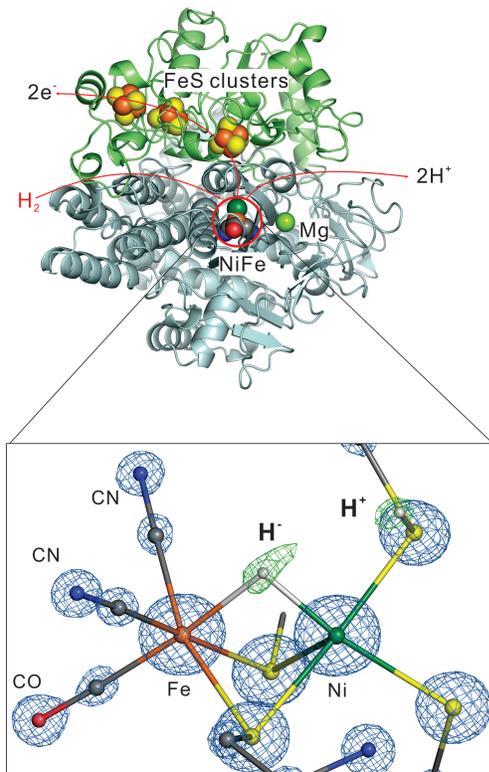


Abbildung 1. (oben) Schematische Darstellung der [NiFe]-Hydrogenase. (Unten) Struktur des aktiven [NiFe]-Zentrums im Ni-R Zustand. Das grüne Netz zeigt die Elektronendichte der Wasserstoffatome.

Proteinkristallographie ist nach wie vor die Methode der Wahl, um die atomare Struktur großer biologischer Makromoleküle zu bestimmen. Eine der größten Limitierungen dieser Methode besteht darin, dass Wasserstoffatome nur schwer zu erfassen sind. Sie machen jedoch etwa 50% aller Atome in Proteinen aus und sind oft in wichtige Interaktionen involviert. Ihre Detektion, die eine besonders hohe Auflösung erfordert, ist von besonderer Bedeutung bei Enzymen, bei denen Wasserstoff direkt an der Reaktion beteiligt ist, wie zum Beispiel bei den Hydrogenasen. Forscher des *MPI für Chemische Energiekonversion* (MPI CEC) haben nun gezeigt, wie durch sorgfältige Präparation reproduzierbar Einkristalle mit herausragender Qualität erhalten werden können, ausreichend für eine Auflösung im subatomaren Bereich. So können die meisten Wasserstoffatome erfasst werden - sogar in der Nähe von Metallatomen. Die neu erhaltenen Informationen und Perspektiven für die Proteinkristallographie werden am Beispiel einer Hydrogenase gezeigt.

Aufgrund der interessanten Möglichkeiten in der Biotechnologie sind Hydrogenasen weltweit im Fokus von Energieforschern und dienen als natürliche Modelle für biomimetische Katalysatoren in der

Wasserstoffproduktion und -umsetzung. Um die Hydrogenasen zu studieren, ist es essentiell die Wasserstoffatome in der Kristallstruktur zu untersuchen. Die Forscher des MPI CEC waren nun erstmals in der Lage, eine ultrahoch aufgelöste Struktur von einer [NiFe]-Hydrogenase zu erhalten, die ein außerordentlich detailliertes Bild des Enzyms in einem spezifischen katalytischen Zustand lieferte. Dieser Zustand wurde bisher noch nicht beschrieben, er ist jedoch von zentraler Bedeutung für die Katalyse. Die Analyse lieferte die Positionen der meisten Wasserstoffatome, zum Beispiel auch die exakte Position des Hydrides und des Protons, die aus der heterolytischen Wasserstoffspaltung des Enzyms hervorgehen. Die direkte Detektion der Produkte der Wasserstoffumwandlung ist eines der wichtigen Ergebnisse dieser Veröffentlichung.

Um die ultrahoch aufgelöste Struktur zu erhalten, haben die Forscher die [NiFe]-Hydrogenase aus dem Bakterium *Desulfovibrio vulgaris* Miyazaki F unter strikt anaeroben Bedingungen isoliert, gereinigt und kristallisiert, um jede Inaktivierung oder oxidative Schädigung des Proteins zu verhindern. Unter Schutzgas/H<sub>2</sub>-Atmosphäre wurde der spezifische Ni-R Zustand in reiner Form erhalten. Sie nutzten einen Synchrotron der dritten Generation (BESSY II, Berlin) um einen Datensatz mit hoher Qualität aufzunehmen, welcher dann sorgfältig analysiert wurde.

Dieses Projekt wurde von der Max-Planck-Gesellschaft, der Deutsche Forschungsgemeinschaft als Teil des Exzellenzclusters RESOLV (EXC 1069), dem BMBF (03SF0355C) und dem EU/Energy Network project SOLAR-H2 (FP7 Vertrag 212508) gefördert.

#### Weitere Informationen:

Der Link zu der Publikation in Nature:

“Hydrogens detected by subatomic resolution protein crystallography in a [NiFe] hydrogenase”

Hideaki Ogata, Koji Nishikawa, and Wolfgang Lubitz

*Nature*, doi: 10.1038/nature14110

<http://www.nature.com/>

Prof. Dr. Dr. h.c. Wolfgang Lubitz, Direktor am Max-Planck-Institut für Chemische Energiekonversion in Mülheim an der Ruhr, 0208/306-3614, [wolfgang.lubitz@cec.mpg.de](mailto:wolfgang.lubitz@cec.mpg.de), <http://www.cec.mpg.de>