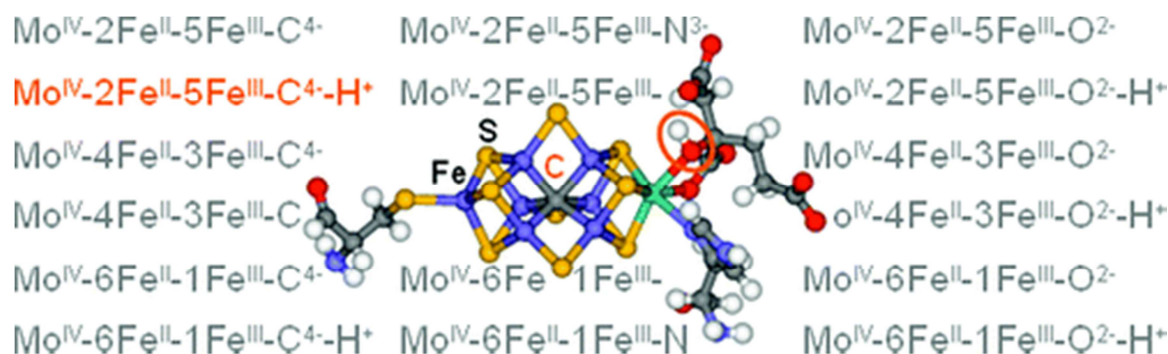




VADÁSZAT A NITROGENÁZ ÉS HIDROGENÁZ KATALITIKUS KLASZTEREINEK "SZELLEM" LIGANDUMJAIRA

Szilágyi Róbert Károly

Szent-Györgyi Albert Kutató Professzor

*Felületek és Nanoszerkezetek Laboratórium, Analitikai Kémiai Intézeti Tanszék
Pannon Egyetem, Veszprém*

Az évtizedek óta folyó biokémiai, szerkezeti, spektroszkópai, és kémiai reaktivitási kutatások egy igen jelentős kísérleti és elméleti adathalmazt hozott létre, amelyre támaszkodva lehetőség nyílt arra, hogy a bioszervetlen kémia két legnagyobb szerkezeti problémáját megoldhassuk. Ezek a biológiai nitrogén rögzítés és a hidrogén előállítás katalitikus Fe-S klasztereinek összetétele, az atomok töltéseloszlása és elektronspin állapota.

Sűrűségfukcionál számítások lehetővé tették, hogy ezt a roppant terjedelmes adatbázist, mintegy közös nevezőre hozzuk és megoldást találjunk a fenti problémákra. Az enzimek aktív centrumában levő Fe-S klasztereket redukált-szimmetriájú közelítésben leírva megvizsgáltuk a vas-ionok spin és oxidációs állapotát, a misztikus "szellem" ligandumok lehetséges összetételét és töltésállapotát, a klaszterek szerkezetét egy minimális, de elégséges fehérje környezettel, a ligandumok protonáltsági fokát, redukációs potenciálokat, és számos spektroszkópai paramétert (csatolási állandók, kémiai eltolódások, és atomtörzs gerjesztés intenzitások).

A hidrogenáz enzim esetében, az elméleti vizsgálatokat tovább vive kísérletileg tesztelhető hipotéziseket állítottunk fel az egyedi klaszter ligandumok katalitikus szerepére és biokémiai eredetére.

Közvetlen kapcsolódó irodalmi hivatkozások:

Nitrogenáz: Harris T.V., Szilágyi R.K.: **Comparative Assessment of the Composition and Charge State of Nitrogenase FeMo-Cofactor** *Inorganic Chemistry*, 2011, 50(11), 4811-4824

Hidrogenáz: Grigoropoulos A., Szilágyi R.K.: **In silico Evaluation of Proposed Biosynthetic Pathways for the Unique Dithiolate Ligand of the H-cluster of [FeFe]-hydrogenase** *Journal of Computational Chemistry*, 2011, 32(15), 3194-3206