**New X-ray spectroscopy explores hydrogen-generating catalyst**

Using a newly developed technique, researchers from Japan, Germany and the U.S. have identified a key step in production of hydrogen gas by a bacterial enzyme. Understanding these reactions could be important in developing a clean-fuel economy powered by hydrogen.

The team studied hydrogenases - enzymes that catalyze production of hydrogen from two widely distributed organisms: ***[Chlamydomonas reinhardtii](https://genome.jgi.doe.gov/Chlre4/Chlre4.home.html)***, a single-cell algae and **[Desulfovibrio desulfuricans](https://en.wikipedia.org/wiki/Desulfovibrio_desulfuricans)**, a bacterium.

In both cases, their hydrogenase enzymes have an active site with two [iron atoms](https://phys.org/tags/iron+atoms/).

"Among hydrogenases, [FeFe] hydrogenase has the highest turnover rate (molecular hydrogen production rate) and therefore has a potential role in the future hydrogen economy, either by a direct use or by a synthetic complex which has a similar reaction center," said Professor Stephen P. Cramer in the UC Davis Department of Chemistry and coauthor on the paper along with graduate students Cindy C. Pham (co-first author) and Nakul Mishra and project scientist Hongxin Wang in the same department.

The researchers used a technique called nuclear resonant vibrational spectroscopy (NRVS) to follow the vibrational structures and analysis activity at the iron atoms in the enzyme. NRVS requires special equipment, and is currently only available at four sites in the world: the SPring-8 synchrotron in Hyogo, Japan, where this study was carried out; the Advanced Photon Source at Argonne National Laboratory, Illinois; the European Synchrotron Radiation Facility in Grenoble, France; and Petra-III in Hamburg, Germany.

Using NRVS, the team could show that the iron atoms briefly form a hydride (iron-hydrogen) before releasing molecular [hydrogen](https://phys.org/tags/hydrogen/) (H2). It's the first successful experiment of its type on naturally occurring [FeFe] hydrogenases, Wang said.

"The successful outcome of this research is due to the broad collaboration between biochemists, spectroscopists, experimental physicists and theoreticians," Wang said. "This starts a journey to pursue iron specific information for all the intermediates in [FeFe] hydrogenase in the future."

Additional authors on the paper, published online in the *Journal of the American Chemical Society* are: Vladimir Pelmenschikov, Technical University of Berlin, Germany; James Birrell, Constanze Sommer, Edward Reijerse and Wolfgang Lubitz, Max Planck Institute for Chemical Energy Conversion, Mülheim an der Ruhr, Germany; Casseday Richers and Thomas Rauchfuss, University of Illinois; Kenji Tamasaku and Yoshitaka Yoda, SPring-8, Hyogo, Japan. The work was supported in part by grants from the National Institutes of Health and the Max Planck Society.

**Новая рентгеновская спектроскопия исследует водородный катализатор**

Используя недавно разработанную технику, исследователи из Японии, Германии и США определили ключевой шаг в производстве газообразного водорода бактериальным ферментом. Понимание этих реакций может иметь важное значение для разработки экономии чистого топлива, питаемой водородом.  
  
Группа изучила гидрогеназы - ферменты, которые катализируют производство водорода из двух широко распространенных организмов: Chlamydomonas reinhardtii, одноклеточные водоросли и Desulfovibrio desulfuricans, бактерии.  
  
В обоих случаях их ферменты гидрогеназы имеют активный сайт с двумя атомами железа.

«Среди гидразонов [FeFe] водородная кислота имеет самую высокую текучесть кадров (скорость молекулярного водорода) и поэтому потенциально играет роль в будущей водородной экономике, будь то прямым использованием или синтетическим комплексом, который имеет аналогичный реакционный центр», - сказал Профессор Стивен П. Крамер в отделе химии UC Davis и соавтор статьи вместе с аспирантами Синди С. Фам (соавтором) и Накулом Мишрой и ученым-исследователем Хунсинь Вангом в том же отделе.  
  
Исследователи использовали метод ядерной резонансной колебательной спектроскопии (NRVS) для наблюдения за колебательными структурами и аналитической активностью на атомах железа в ферменте. NRVS требует специального оборудования и в настоящее время доступна только на четырех сайтах в мире: синхротрон SPring-8 в Хиого, Япония, где это исследование было проведено; Расширенный источник фотонов в Аргоннской национальной лаборатории, Иллинойс; Европейский синхротронный радиационный комплекс в Гренобле, Франция; и Петра-III в Гамбурге, Германия.

Используя NRVS, команда могла показать, что атомы железа ненадолго образуют гидрид (железо-водород) до высвобождения молекулярного водорода (H2). Это первый успешный эксперимент такого типа на встречающихся в природе [FeFe] -гидрогеназах, сказал Ванг.  
  
«Успешный результат этого исследования объясняется широким сотрудничеством между биохимиками, спектроскопистами, экспериментальными физиками и теоретиками», - сказал Ванг. «Это начинает путешествие, чтобы в будущем получить конкретную информацию о железе для всех промежуточных продуктов в [FeFe] -гидрогеназе».

Дополнительными авторами, опубликованными в журнале «Американское химическое общество», являются: Владимир Пельменщиков, Берлинский технический университет, Германия; Джеймс Бирелл, Констанц Соммер, Эдвард Рейджерс и Вольфганг Любитц, Институт химической конверсии им. Макса Планка, Мюльхайм-на-Руре, Германия; Касседай Ричерс и Томас Рауффусс, Иллинойский университет; Кенджи Тамасаку и Йошитака Йода, SPring-8, Хёго, Япония. Работа частично поддерживалась грантами Национального института здоровья и Общества Макса Планка.