

CLAUDIO GRECO

# Im Fokus: Der anorganische Kern von Enzymen

## Theoretische Bioanorganische Chemie

**Bioanorganische Chemie: ist es ein Widerspruch in sich? Es mag überraschend sein, aber die anorganische Chemie spielt eine wesentliche Rolle in (biologischen) Lebensprozessen. Das Ziel unserer Forschungsgruppe ist die Untersuchung der Rolle des anorganischen Kerns von Enzymen, der Metall-Ionen benötigt, um seine biologische Funktion erfüllen zu können. Dazu wenden wir die Gesetze der Quantenchemie und der klassischen Physik an, die wir zu neuen theoretischen Konzepten zusammenfügen und mit effizienten Computertechniken untersuchen.**

### Allgemeine Einführung in das Fachgebiet

Mehrere Proteine enthalten Metall-Ionen, die für ihre biologische Aktivität erforderlich sind. Solche »Metalloproteine« sind Gegenstand intensiver Forschung nicht nur von experimentellen Biochemikern, die an gereinigten Samplen (Proben) arbeiten, sondern auch von theoretischen Chemikern, die Computermodelle von Proteinen und Enzymen entwickeln. Die experimentellen Chemiker stehen dabei vor der Herausforderung, die flüchtigen und kurzlebigen Arten charakterisieren zu können. Die theoretische

Analyse ergänzt die Arbeit der experimentellen Chemiker dahingehend, dass der theoretisch-anorganische Chemiker die Eigenschaften dieser Verbindungen in einer Computerdarstellung reproduziert, die nicht »vom Zerfall bedroht« ist. Mittels der Computermodelle lassen sich dann Vergleiche mit den verfügbaren experimentellen Ergebnissen vornehmen.

### Forschungsgebiete

Unsere Forschungsgruppe widmet sich der theoretischen Untersuchung von Enzymen, die an den

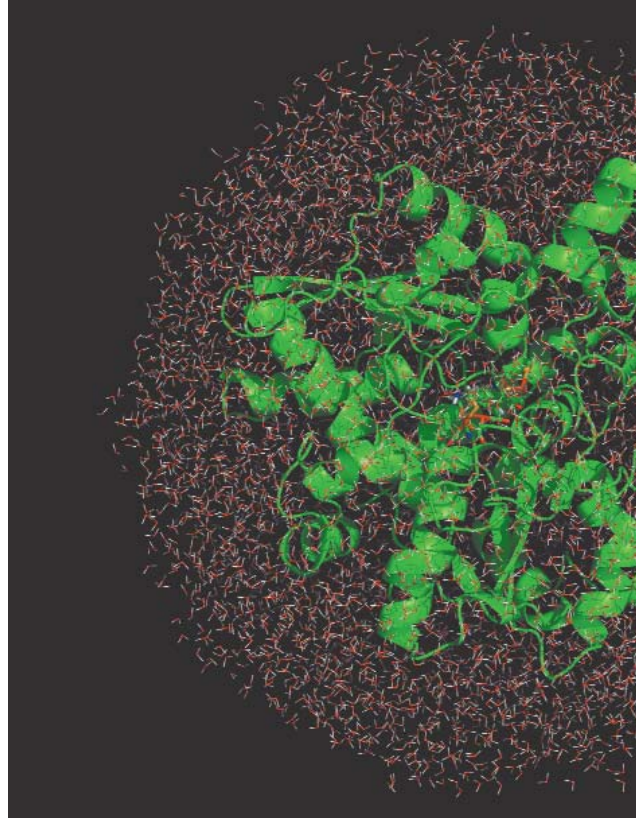


Abb. 1

Dargestellt ist ein Metalloprotein in einer Wasserlösung.

Schlüsselprozessen von mikrobiellen Stoffwechselprozessen beteiligt sind, die zum einen bei der Produktion des molekularen Wasserstoffs (Hydrogenasen) und zum anderen bei der Oxidation von Methan (Methan Monooxygenasen) auftreten. Unser Ziel ist die Beschreibung von relevanten Strukturen und elektronischen Eigenschaften des ganzen Enzyms, eine sehr anspruchsvolle Aufgabe, die durch die Anwendung des QM/MM-Ansatzes bewältigt werden kann: der metallhaltige Teil des Proteins wird durch quantenchemische Verfahren behandelt, während der Rest der Proteinmatrix, der tausende Atome von leichten Elementen enthält,

### Abstract

Bio-inorganic chemistry: is this an oxymoron? It might be surprising, but inorganic chemistry plays a fundamental role in biological processes. The aim of our research group is the study of the role of the inorganic core of enzymes which need metal ions to accomplish their biological function. To do this, we use the laws of quantum chemistry and of classical physics, joined together in a theoretical effort that encompasses the development of new concepts and efficient computational techniques.

### Internet

[www.unicat.tu-berlin.de/Greco-Claudio.581.o.html](http://www.unicat.tu-berlin.de/Greco-Claudio.581.o.html)

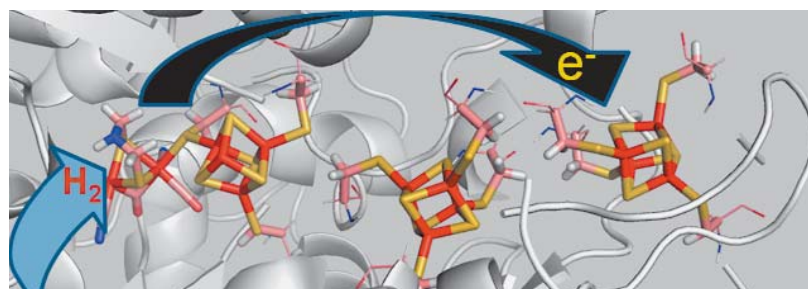
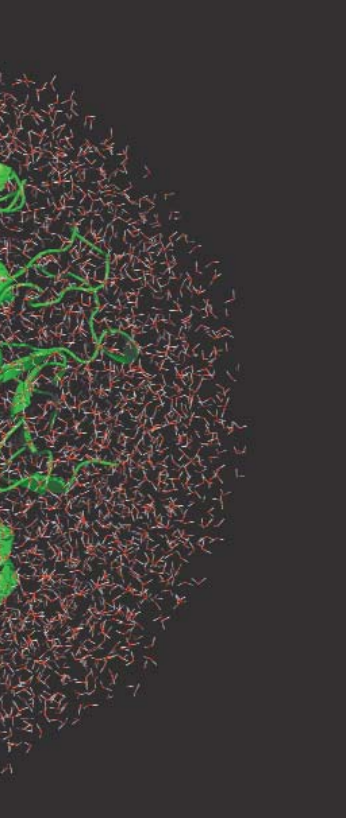


Abb. 2  
Eisen-Schwefel-Cluster als reaktives Zentrum eines Proteins, das gewöhnlich aus Bakterien gewonnen wird.

mit den einfacheren Gesetzen der klassischen Physik zufriedenstellend modelliert werden kann.

Vom mechanistischen Standpunkt aus, katalysieren die Enzyme, die wir untersuchen, Redoxprozesse: das bedeutet, dass die Elektronen als Reagenzien oder Produkte der entsprechenden chemischen Gleichungen erscheinen. Deswegen müssen die Elektronen während der Katalyse innerhalb der Proteinmatrix effizient mobilisiert werden. Unser Ziel ist es, die Zwischenarten, die an diesem komplizier-

ten biologischen Prozess beteiligt sind, zu charakterisieren. Diese Aufgabe umfasst daher auch die Entwicklung neuer Analyse-Konzepte und die Planung wirksamer computerbasierter Strategien zur Untersuchung der Redoxprozesse.

#### Ausgewählte Publikationen

- Greco C. et al., *Inorg. Chem.* 2011; 50:6987–95.
- Greco C. et al., *Chemistry* 2011; 17:1954–1965.
- Greco C. et al., *Dalton Trans.* 2010; 39:7320–9.
- Greco C. et al., *Inorg. Chem.* 2007; 46:5911–21.
- Greco C. et al., *Inorg. Chem.* 2007; 46:108–16.

#### Kooperationen

- Prof. Christian Limberg, Dr. Kallol Ray, Humboldt-Universität zu Berlin: Die Kooperation widmet sich der Charakterisierung von biomimetischen Modell-Komplexen, die strukturellen Eigenschaften der Methan Monooxygenasen ähneln, und der Untersuchung der Reaktionsfähigkeit von Cobalt-Komplexen, die an Wasserstofftransfer-Reaktionen beteiligt sind.
- Prof. Ulf Ryde, Universität Lund (Schweden); Prof. Luca De Gioia, Mailand-Bicocca Universität (Italien); Prof. Markus Reiher, ETH Zürich (Schweiz): Die Kooperationen widmen sich der Charakterisierung der Struktur-, Redox- und elektronischen Eigenschaften der Hydrogenasen.

#### Dr. Claudio Greco

Jg. 1980. Claudio Greco ist derzeit »Nachwuchsgruppenleiter« in Theoretischer Bioorganischer Chemie am Institut für Chemie der Humboldt-Universität zu Berlin. Neben Deutschland verbrachte er Forschungsaufenthalte auch in Italien und Schweden: 2009–2011 Wissenschaftlicher Mitarbeiter an der Universität Mailand-Bicocca (Italien); 2008–2009 Humboldt Fellow an der Humboldt-Universität zu Berlin; 2004–2007 Doktorand an der Universität Mailand-Bicocca (Italien) und Gastdotorand an der Universität in Lund (Schweden).

Humboldt-Universität zu Berlin • Institut für Chemie

E-Mail: [grecocla@hu-berlin.de](mailto:grecocla@hu-berlin.de)

[www.unicat.tu-berlin.de/Greco-Claudio\\_581.o.html](http://www.unicat.tu-berlin.de/Greco-Claudio_581.o.html)



Für die Übersetzung des Beitrags aus dem Englischen danke ich herzlich Dr. Antonella Ciancetta und Dr. Michael Rieger.