

Pressemitteilung

Freie Universität Berlin

Christine Xuan Müller

10.05.2023

<http://idw-online.de/de/news814078>

Forschungsergebnisse, Wissenschaftliche Publikationen
Geowissenschaften, Physik / Astronomie, Umwelt / Ökologie
überregional



Mit 40 Kilogramm Spinat, 3 Millionen Laserblitzen und 600.000 simulierten Atomen: Forschern gelingt Rekonstruktion

„Nature“-Studie von Physikern der Freien Universität Berlin und der Universität L’Aquila liefert auch Hinweise zu Produktion von grünem Wasserstoff

Ein Forschungsteam um den Physiker der Freien Universität Berlin, Prof. Dr. Holger Dau, und dem Physiker der italienischen Universität L’Aquila, Prof. Dr. Leonardo Guidoni, hat die Bewegung von Elektronen und Atomen in der photosynthetische Sauerstoffbildung – eine Lebensgrundlage für alle atmenden Lebewesen auf der Erde – experimentell und rechnerisch nachverfolgen können. Die Studie dazu ist gerade im renommierten Fachmagazin „Nature“ erschienen (<https://www.nature.com/articles/s41586-023-06008-5>). Sie liefert Einblicke in den biologischen Prozess, der wahrscheinlich in den letzten drei Milliarden Jahren auf der Erde unverändert abgelaufen ist. Die Erkenntnisse können auch für die Produktion von grünem Wasserstoff oder anderen erneuerbaren Brennstoffen bedeutsam sein.

Der Sauerstoff (O₂) der Erdatmosphäre wird durch die lichtgetriebene Spaltung von Wasser in Pflanzen, Algen und Cyanobakterien gebildet. Dieser Prozess konnte nun in aufwendigen Experimenten mit Infrarotlicht nachverfolgt und mittels quantenchemischer Simulationen verstanden werden, wie in einem Artikel der Forschungsgruppen des Physikers Prof. Dr. Holger Dau von der Freien Universität Berlin und seines italienischen Kollegen Prof. Dr. Leonardo Guidoni von der Universität L’Aquila in der Fachzeitschrift „Nature“ beschrieben ist. Die Wissenschaftler betonen auch den Zusammenhang zur Produktion von grünem Wasserstoff oder anderen erneuerbaren Brennstoffen, die dem biologischen Vorbild folgt. „In technischen Systemen zur Produktion erneuerbarer Brennstoffe sind sowohl die Verwendung seltener Edelmetalle als auch hohe Energieverluste ein Problem. Nun können gezielt edelmetallfreie Materialien entwickelt werden, bei denen die gekoppelte Bewegung der Elektronen und Protonen minimale Energieverluste ermöglicht.“, sagt Holger Dau.

Die Photosynthese liefert die Energie für das Leben auf der Erde, indem sie Sonnenenergie in chemischer Form speichert. In der Photosynthese sowie auch in technischen Systemen für eine nachhaltige Treib- und Brennstoffproduktion ist die Wasserspaltung eine zentrale Reaktion, mittels der mobile Elektronen und Protonen aus dem Rohstoff Wasser gewonnen werden können und molekularer Sauerstoff (O₂) freigesetzt wird. Die heutige sauerstoffreiche Atmosphäre der Erde resultiert aus der photosynthetischen O₂-Produktion während der Wasserspaltung am proteingebundenen Mangan-Cluster des Photosystems II der Pflanzen, Algen und Cyanobakterien.

Die Bildung des O₂-Moleküls beginnt in einem Zustand mit vier angesammelten Elektronenlöchern, dem S₄-Zustand, der vor mehr als einem halben Jahrhundert postuliert wurde und seitdem rätselhaft geblieben ist. Die Forschungsteams um Dau und Guidoni haben nun diese fehlende Schlüsselement in der photosynthetischen O₂-Bildung identifizieren können. Nach mehrjähriger Vorbereitung gelang ein aufwendiges Experiment, mit dem die Bewegungen der Elektronen und Protonen verfolgt werden konnten. Hierzu wurden Partikel des Photosystem II Chlorophyll-Protein-Komplexes aus 40 Kilogramm Spinat isoliert. Dann wurden über 7 Monate ca. 3 Millionen Laserblitze gefeuert und für jeden von diesen der Zeitverlauf eines Infrarotsignals mit Mikrosekundenzeitauflösung aufgezeichnet. (Eine Mikrosekunde entspricht

einer Millionstel Sekunde). Mehrere Terabyte an Messdaten wurden anschließend analysiert und ergaben in Kombination mit Molekülmechanik-Berechnungen für fast 600.000 Atome und quantenchemischen Simulationen das folgende Bild:

Zunächst wird im Protein eine entscheidende Protonenleerstelle durch elektrostatisch ferngesteuerte Seitenkettendeprotonierung erzeugt. Anschließend wird in einem erstaunlichen Einzelelektronen-Multiprotonen-Transferereignis ein reaktives Sauerstoffradikal gebildet. Dies ist der langsamste Schritt in der photosynthetischen O₂-Bildung mit nur moderater Energiebarriere und überraschender entropischer Verlangsamung, was auch der Publikation in Nature ihren Namen gab („The electron-proton bottleneck in photosynthetic oxygen evolution“). Die Forschenden um Dau und Guidoni identifizieren somit den zuvor rätselhaften S₄-Zustand als ein Sauerstoffradikalzustand; auf seine Bildung folgt eine schnelle O-O-Bindung und O₂-Freisetzung.

In Verbindung mit früheren Durchbrüchen bei experimentellen und rechnerischen Untersuchungen ergibt sich nun ein überzeugendes atomistisches Bild der photosynthetischen O₂-Bildung, wie die Wissenschaftler betonen. Die gemeinsame Arbeit des deutsch-italienischen Teams liefert somit einen Einblick in einen biologischen Prozess, der wahrscheinlich seit drei Milliarden Jahren auf die gleiche einzigartige Weise von statten gegangen ist, wodurch auch das wissenschaftsbasierte Design künstlicher Wasserspaltungssysteme unterstützen wird.

„Es hat einen langen Atem gebraucht. Wir haben die Arbeiten an dem zentralen Infrarot-Experiment vor 15 Jahren begonnen und erst jetzt waren die Ergebnisse reif für eine Veröffentlichung“, sagt Holger Dau und betont, dass dies nur durch die langfristige Unterstützung durch die Deutsche Forschungsgemeinschaft möglich geworden sei. Diese erfolgte insbesondere im Rahmen eines Sonderforschungsbereich (SFB 1078), der im Jahr 2013 auf Betreiben von Holger Dau und seinen Kolleg*innen an der Freien Universität eingerichtet wurde und in dem bis heute mehr als 20 Berliner Forschungsgruppen zusammenarbeiten. Holger Dau betont „Die Möglichkeit wichtigen Forschungsfragen auch langfristig nachzugehen ist eine besondere Stärke der Wissenschaftsförderung durch die Deutsche Forschungsgemeinschaft, um die uns weltweit Kolleginnen und Kollegen beneiden.“ Da passe es ins Bild, dass weitere wichtige Ergebnisse langjähriger Forschung zur photosynthetische Sauerstoffentwicklung unter Beteiligung von Prof. Dr. Athina Zouni und Prof. Dr. Holger Dobbek von der Humboldt Universität Berlin erzielt wurden und zeitgleich im Fachmagazin „Nature“ veröffentlicht werden konnten.

wissenschaftliche Ansprechpartner:

Kontakt: Prof. Holger Dau, Freie Universität Berlin, Fachbereich Physik, Biophysik, Photosynthese, E-Mail: holger.dau@fu-berlin.de

Originalpublikation:

Link zur Studie „The electron-proton bottleneck of photosynthetic oxygen evolution“:
<https://www.nature.com/articles/s41586-023-06008-5>

URL zur Pressemitteilung: https://www.fu-berlin.de/presse/informationen/fup/2023/fup_23-102-sauerstoffbildung-erd-e-physik-nature-studie/index.html