

Fotosintetinio FCP komplekso chlorofilų tarpusavio sąveikos modeliavimas

Modeling of Inter-Chlorophyll Couplings in the Photosynthetic FCP Complex

Austėja Mikalčiūtė^{1,2}, Andrius Gelžinis^{1,2}, Jevgenij Chmeliov^{1,2}

¹Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Cheminės fizikos institutas, Saulėtekio al. 9, Vilnius

²Fizinių ir technologijos mokslų centras, Molekulinių darinių fizikos skyrius, Saulėtekio al. 3, Vilnius

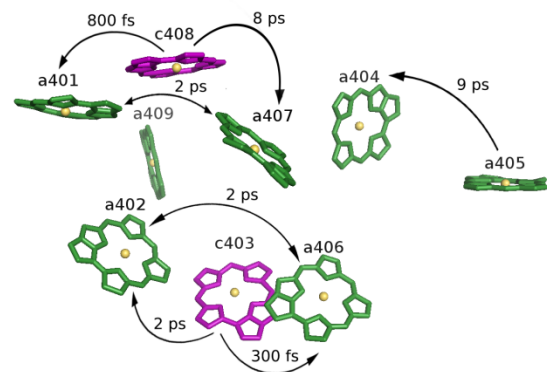
austeja.mikalciute@ff.stud.vu.lt

Fotosintezė – vienas svarbiausių gyvybę Žemėje užtikrinančių procesų: dėl šio reiškinio gali egzistuoti ne tik tūkstančiai įvairių bakterijų, dumblių ar augalų, bet ir gausybė nuo jų priklausomų gyvūnijos karalystės atstovų. Fotosintezės procesai daugmaž vienodai intensyviai vyksta sausumoje ir vandenyje, o fotosintetinantys organizmai yra sugebėję prisitaikyti išlikti netgi tokiose nepalankiose klimatinėse sąlygose kaip dykumos ar 80 metrų gylis po vandeniu [1]. Vieni svarbiausių, bet ne itin plačiai aptariamų fotosintetinančių organizmų yra titnagdumbliai, kurie atlieka netgi 20% pasaulinės anglies dioksido fiksacijos [2]. Šie dumbliai pasižymi išskirtiniu šviesorankos kompleksu – fukoksantinas ir chlorofilus rišančiu baltymu (angl. *fucoxanthin-chlorophyll binding protein* (FCP)). Šis FCP kompleksas nemažai struktūriškai skiriasi nuo aukštesniesiems augalams būdingo šviesorankos komplekso LHCII, nes FCP yra randami tokie pigmentai kaip chlorofilas *c* ar fukoksantinas, kurie geba sugerti žalios-mėlynos spinduliuotės šviesą, kuri yra prieinama vandenyje gyvenantiems organizmams. Nors fukoksantino-chlorofilo kompleksas jau kurį laiką yra sudominęs mokslininkų bendruomenę, pirmoji jo kristalografinė struktūra buvo nustatyta tik 2019 m. [3], kas suteikė galimybę bandyti detaliau išnagrinėti šviesorankos reiškinį titnagdumbliuose iš teorinės pusės.

Šiame darbe buvo nagrinėtos pirmosios sužadintos FCP komplekso chlorofilų (Chl) būsenos ir iš gautų rezultatų buvo apskaičiuotos jų tarpusavio sąveikos. Tyrimo metu buvo naudota Baltymų duomenų bazėje prieinama FCP struktūra iš *Phaeodactylum tricornutum* titnagdumblio [3]. Pirmoji sužadinta pasirinktų Chl *a* ir *c* pigmentų būseną buvo modeliuota pasitelkiant nuo laiko priklausančią tankio funkcionalo teoriją (TD-DFT), taikant skirtingus funkcionalus ir bazinių funkcijų rinkinius. Palyginus rezultatus, kaip priimtinausias rezultatų ir skaičiavimo laiko kaštų atžvilgiu, buvo pasirinktas CAM-B3LYP funkcionalas su 6-31G(d) bazinių funkcijų rinkiniu. Chlorofilų fitilo grandinės atliekant tolesnį modeliavimą buvo apkarpytos, nes fitilo uodega neturėjo didelės įtakos vertinant pigmento šuolio dipolinio momento absoliučią vertę ir kryptį, kuriuos buvo siekta išnagrinėti šio tyrimo metu. Toliau buvo atlikti TD-DFT skaičiavimai CAM-B3LYP/6-31G(d) metodika visiems FCP komplekse esantiems chlorofilams ir įvertinti jų šuolio dipoliniai momentai. Tuomet, pasitelkiant šiuos duomenis ir struktūrinę informaciją apie pigmentų

išsidėstymą baltyme, buvo pritaikytas taškinių dipolių artinys apskaičiuoti pigmentų tarpusavio sąveikoms.

Gauti skaičiavimai nurodo, kad stipriausios vyraujančios sąveikos yra tarp kristalografiškai išskiriamų Chl klasterių, tarp kurių pigmentų yra maži tarpmolekuliniai atstumai: visada tokia klasteryje vyrauja stipri sąveika tarp Chl *c* bei *a* ir taip pat tarp Chl *a* poros. Modeliuojant Förster energijos pernašą FCP komplekse, buvo gauta, kad energijos pernašos tarp pigmentų trukmė tame pačiame klasteryje gali vyrauti nuo 300 fs iki kelių ps dėl vyraujančių stiprių sąveikų tarp pigmentų. Taip pat gauti rezultatai rodo greitą energijos pernašą nuo Chl *c* į *a*, kuri yra stebima ir eksperimentiniuose tyrimuose su kitais titnagdumbliais.



1 pav. Chlorofilų išsidėstymas *Phaeodactylum tricornutum* FCP komplekse [3]. Rodyklės nurodo greičiausius energijos pernašos kanalus 300 K temperatūroje.

Reikšminiai žodžiai: fotosintezė, titnagdumbliai, fukoksantino-chlorofilo kompleksas, tankio funkcionalo teorija, pigmentų tarpusavio sąveika.

Literatūra

- [1] J. Overmann, H. Cypionka, and N. Pfennig, An extremely low-light adapted phototrophic sulfur bacterium from the Black Sea, *Limnol. Oceanogr.*, 1992, 37, 150–155.
- [2] S. Malviya, E. Scalco, S. Audic et al., Insights into global diatom distribution and diversity in the world's ocean, *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.*, 2016, 113, 1516–1525.
- [3] W. Wang, L.-J. Yu, C. Xu et al., Structural basis for blue-green light harvesting and energy dissipation in diatoms, *Science*, 2019, 363, 1–8.