

Heliobakterijos reakcinio centro pigmentų sužadavimo energijų modeliavimas naudojant elektrostatinį modelį

Energy landscape and computational spectroscopy of heliobacterial reaction center obtained by electrostatic modeling

Kristina Zakutauskaitė, Mindaugas Mačernis, Darius Abramavičius
Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, LT-10222 Vilnius
Cheminės Fizikos Institutas
kristina.zakutauskaite@gmail.com

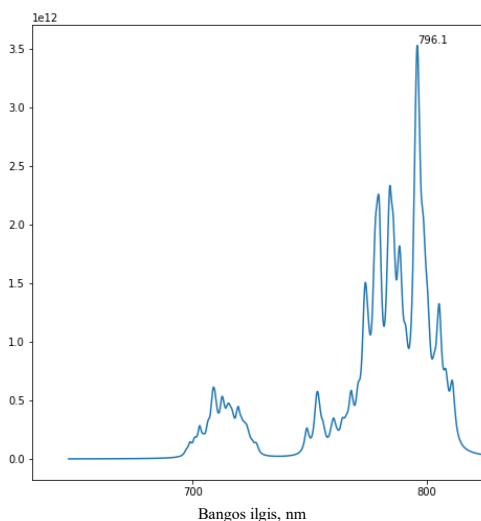
Tikėina, jog “Heliobacterium modesticaldum” (hRC) reakcijos centras (RC) savo struktūra yra artimiausias senesiam prototipiniam fotosintetiniam reakciniam centrui ir dėl šios priežasties gali vaidinti svarbų vaidmenį atskleidžiant fotosintezės kilmę bei ankstyvąją evoliuciją. Manoma, jog šie reakciniai centrai kadaise išsivystė iš homodimerinio baltymo. Heliobakterijos- antra pagal dydį dažniausiai randamų fototropų grupių, vykdančių fotosintezę negaminant deguonies. Tai suteikia paspirtį tyrinėti hRC struktūrą bei funkcinis santykius pažangiais spektroskopiniais tyrimais bei teoriniais modeliais.

Mes patobulinome elektroninių sužadimų sugerties spektro hRC 1-mo tipo reakcijos centro teorinį modelį naudodami pilną baltymo struktūrinę informaciją parametrizuojant Frenkelio eksitonų modelį.

Šiame atvirų kvantinių sistemų teoriniame darbe atliekama elektroninių sužadimų teorinė analizė naudojant eksitoninį modelį. Rezultatai lyginami su lazerinės spektroskopijos eksperimentiniais duomenimis, nusakančiais šios fotosintetinės sistemos atsaką į įvairius šviesos signalus iš [1] bei [2]. Pradėjome nuo ankščiau publikuoto Itoh ir Kimura teorinio modelio [3], skirto tirti hRC sužadimų dinamikai. Gautermano keturių orbitalių modelis pritaikomas apibūdinti pigmentų optiniams sužadimams įskaitant Qx (aukštesnės energijos) bei Qy (žemesnės energijos) molekulinis sužadimus. Naudojant komplekso atomų išsidėstymą (gautą naudojant PDB duomenų bazę), atlikus sužadintų būsenų analizę (naudojant nuo laiko priklausomą tankio funkcionalo teoriją- TDDFT) bei dalinių krūvių informaciją (gautą PDB2PQR įrankiu), mes atnaujinome sistemos Hamiltonianą suskaičiavę pigmentų lokalių optinių sužadimų energijas, eksitonines rezonansines sąveikas tarp pigmentų, bei suskaičiavome sugerties spektrą, remdamiesi nauju modeliu 1 pav.

Ankščiau naudoti šios fotosistemos teoriniai modeliai įskaitė tik žemesnės sužadavimo energijos šuolius- Qy, kurie dalyvauja fotosintetiniame saulės energijos surinkimo bei konversijos procesuose reakciniuose centruose. Kitą vertus, ankščiau ignoruota Qx sužadavimo būseną gali būti svarbi reakcinių centrų funkciniai struktūriniai analizė. Jos sužadavimo dipolinis momentas ženkliai mažesnis nei Qy taigi Qx šuolis yra labiau lokalus. Dėl šios priežasties Qx sužadimų analizė gali padėti tirti individualių (bakterio)chlorofilų

charakteristikas: individualias sužadavimo energijas, lokalias sąveikas su baltymu.



1 pav. hRC gūgerties spektras, gautas naudojant elektrostatinį modelį

Reikšminiai žodžiai: atviros kvantinės sistemos, reakcinis centras, elektroniniai sužadimai, elektrostatinis, sužadimai.

Literatūra

- [1] Neerken, S.; Aartsma, T. J.; Ames, J. Pathways of Energy Transformation in Antenna Reaction Center Complexes of Heliobacillus mobilis. *Biochemistry*, 2000, 39, 3297-9904.
- [2] Miyamoto, R.; Iwaki, M.; Mino, H.; Harada, J.; Itoh, S.; Oh-oka, H. ESR Signal of the Iron – Sulfur Center FX and Its Function in the Homodimeric Reaction Center of Heliobacterium modesticaldum. *Biochemistry* 2006, 45, 6306–6316.
- [3] A. Kimura and S. Itoh. Theoretical model of exciton states and ultrafast energy transfer in heliobacterial type i homodimeric reaction center, *The Journal of Physical Chemistry*, 2018, 11852-11859.