

## BALTYMINĖS APLINKOS ELEKTROSTATINĖ ĮTAKA ŠVIESORANKOS KOMPLEKSŲ PIGMENTŲ SUŽADINTOSIOMS BŪSENOMS

Gabrielė Rankelytė<sup>1,2</sup>, Jevgenij Chmeliov<sup>1,2</sup>, Andrius Gelžinis<sup>1,2</sup>, Leonas Valkūnas<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Fizinių ir technologijos mokslų centras, Molekuliųjų darinių fizikos skyrius

Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius, el. p.: gabriele.rankelyte@ftmc.lt

<sup>2</sup>Cheminės fizikos institutas, Fizikos fakultetas, Vilniaus universitetas

Saulėtekio al. 9, III rūmai, LT-10222, Vilnius

Fotosintezė yra vienas iš svarbiausių Žemėje vykstančių procesų. Patys našiausi šį procesą vykdančios organizmai yra sausumos augalai [1]. Jų chloroplastuose esančioje tilakoido membranoje išsivystė dvi fotosintezę vykdančios sistemos – pirmoji (PSI) ir antroji (PSII) fotosistema, kiekviena su savo šviesorankos antena (atitinkamai LHCI ir LHCI)II). Pirmoji fotosistema yra pats našiausias šviesos pavertimo į energiją aparatas. Beveik visa fotonų energija yra panaudojama krūvių atskyrimo procesui reakcijos centruose vykdyti, taigi PSI kvantinis našumas yra beveik lygus vienetui [2]. Viena iš būtinų sąlygų tokiam aukštam našumui pasiekti yra labai greita sužadavimo energijos pernaša tarp pigmentų šviesorankos antenoje. LHCI antenoje sužadavimo energijos pernašai didelę įtaką turi tarp dviejų arba daugiau pigmentų susidaranti krūvio pernašos (CT) būsenos [3]. Keletas krūvio pernašos būsenų padėčių yra žinoma, tačiau jos ne iki galo paaškina pirmosios fotosistemos sugerties ir emisijos spektruose stebimus reiškinius [4] (pvz. antrosios smailės susiformavimas antenos fluorescencijos spektre).

Pirmoji fotosistema sugeria ir fluorescuoja šviesą prie ilgiausių bangos ilgių, lyginant su kitais šviesorankos kompleksais. Augaluose PSI šviesorankos antena susideda iš keturių subkompleksų, kurie pasižymi panašia erdvine struktūra, tačiau demonstruoja skirtingas spektrines savybes. Labiausiai į raudonąją spektro pusę pasislinkusi (ties 733 nm) minėtoji antroji smailė yra stebima Lhca4 subkomplekso fluorescencijos spektre [5].

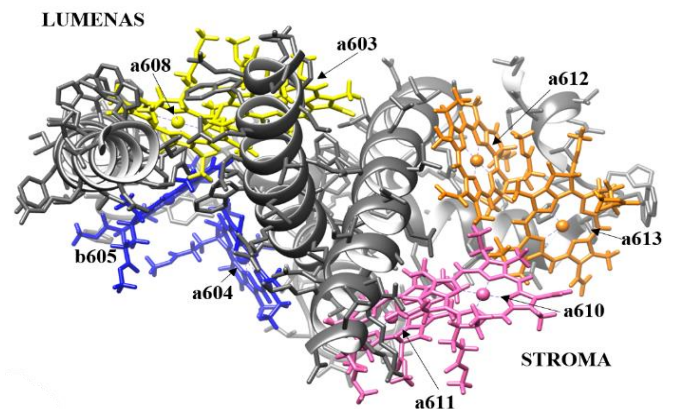
Pigmentai šviesorankos antenoje yra apsupti kitų pigmentų bei baltymo. Norint nuodugniai išanalizuoti tiek eksitoninę, tiek ir krūvio pernašos būsenas lemiančią sąveiką tarp chlorofilo molekulių, yra būtina įskaityti aplinkos molekulių daromą įtaką pigmentų sužadintosioms būsenoms. Panašių tyrimų, kurie nagrinėtų aplinkos įtaką eksitoninėms pigmentų būsenoms LHCIII arba FMO struktūrose, gausu, tačiau tyrimų, kurie nagrinėtų krūvio pernašos būsenas ir LHCI aplinkos kuriamą įtaką joms, trūksta.

Lhca4 erdvinė struktūra (1 pav.) buvo gauta kaip PSI superkomplekso ketvirtoji grandinė, kuri yra laisvai prieinama baltymų duomenų bazėje PDB [6]. Atsižvelgiant į sužadintųjų būsenų

savybes vakuume, buvo nustatytos pasirinktų chlorofilo dimerų krūvio pernašos būsenos. Siekiant įskaityti aplinkos molekulių įtaką šioms būsenoms, baltymas bei pigmentai buvo aprašyti daliniais atominiais krūviais. Energijos poslinkis dėl aplinkos elektrosstatinės įtakos buvo apskaičiuotas CDC metodu [7] pagal (1) formulę:

$$\Delta E_m = \frac{1}{\epsilon_{\text{eff}}} \sum_l \sum_{\eta, j} \frac{(q_l^{(m)}(s, s) - q_l^{(m)}(0, 0)) q_j^{(\eta)}(0, 0)}{|R_l^{(m)} - R_j^{(\eta)}|}. \quad (1)$$

Čia  $\epsilon_{\text{eff}}$  yra aplinkos efektinė dielektrinė skvarba,  $m$  žymi tiriamąjį dimerą,  $q_l^{(m)}(s, s)$  ir  $q_l^{(m)}(0, 0)$  yra šio dimero atitinkamai sužadintosios ir pagrindinės būsenos daliniai krūviai.  $q_j^{(\eta)}(0, 0)$  yra tiriamąjį dimerą supančių pigmentų ir baltymo daliniai krūviai.  $R_l^{(m)}$  ir  $R_j^{(\eta)}$  yra atitinkamai tiriamojo dimero ir aplinkos dalelių koordinatės.



1 pav. Lhca4 erdvinė struktūra. Pilkai pavaizduotas baltymas, spalvotai – keturi iš dvylikos tiriamųjų dimerų. Karotenoidai nepavaizduoti.

### Literatūra

1. A. Larkum, Curr. Opin. Biotechnol. **21**, 271–276 (2010).
2. R. Croce and H. Van Amerongen, Photosynth. Res. **116**, 153–166 (2013).
3. M. Tros, V. I. Novoderezhkin, R. Croce, R. van Grondelle, and E. Romero, Phys. Chem. Chem. Phys. **22**, 25720–25729 (2020).
4. T. Morosinotto, M. Mozzo, R. Bassi, and R. Croce, J. Biol. Chem. **280**, 20612–20619 (2005).
5. R. E. Blankenship, *Molecular mechanisms of photosynthesis* (John Wiley & Sons, 2021).
6. X. Qin, M. Suga, T. Kuang, and J.-R. Shen, Science **348**, 989–995 (2015).
7. J. Adolphs, F. Müh, M. E.-A. Madjet, and T. Renger, Photosynth. Res. **95**, 197–209 (2008).