

Spektroskopinės antrosios fotosistemos reakcijų centro savybės

Spectroscopic properties of photosystem II reaction center

Andrius Gelžinis^{1,2}, Darius Abramavičius¹, Jennifer P. Ogilvie³, Leonas Valkūnas^{1,2}

¹Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9-III, 10222 Vilnius

²Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 3, 10257 Vilnius

³Department of Physics, University of Michigan, Ann Arbor, 48109, USA

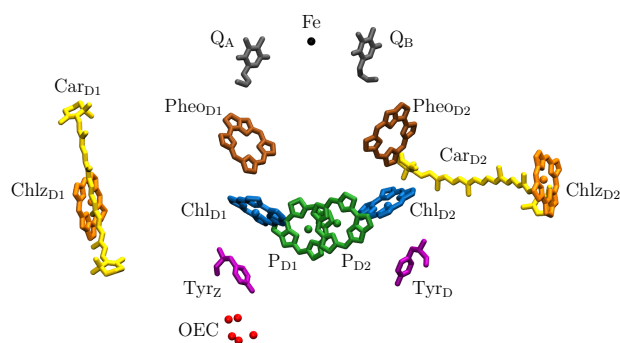
andrius.gelzinis@ff.vu.lt

Antroji fotosistema (PSII) yra vienintelis žinomas molekulinis biologinis kompleksas, gebantis suskaidyti vandenį, todėl ji yra ne tik žmonijai, bet ir kitiems gyviems organizmams reikalingo deguonies šaltinis. Jos reakcijų centre (RC) (žr. 1 pav.) vyksta pirminis krūvio atskyrimas [1]. Nepaisant daugelio tyrimų, dar nėra visuotinio sutarimo dėl krūvio atskyrimo kelių bei šiame procese dalyvaujančių būsenų.

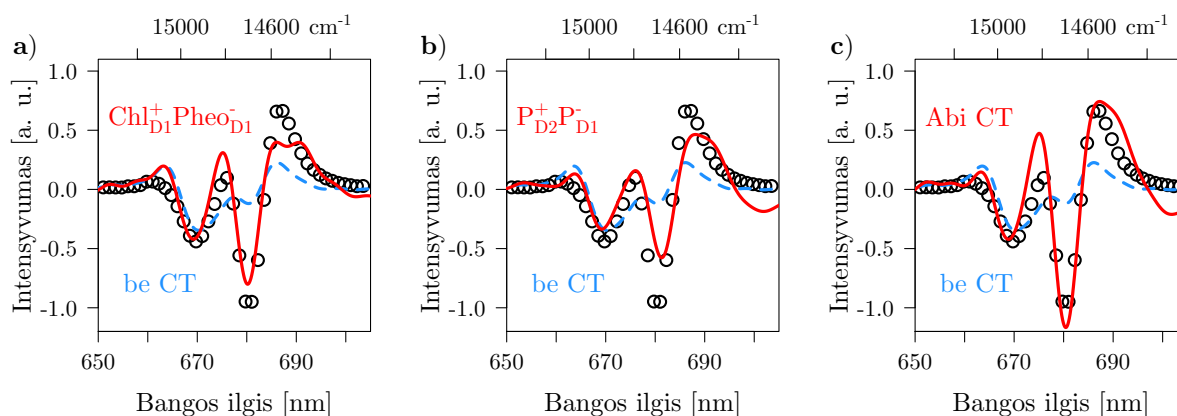
Ankstesniuose darbuose buvo pristatytas PSIIRC stipriojo ryšio modelis [2]. Šiame pranešime aptariamas atnaujintas modelis, į kurį įtraukta viena krūvio pernašos (CT) būsena. Modelio parametrai (pigmentų energijos, tinkle, sąveikos su virpesiniais laisvės laipsniais stiprumas) buvo nustatyti derinant suskaičiuotus spektrus su eksperimentiniais rezultatais. Skaičiavimai atlikti panaudojant ctR teoriją [3]. Buvo gautas geras sutapimas tarp eksperimentinių ir sumodeliuotų spektrų.

Taip pat remiantis ctR teorija buvo sumodeliuoti 77 K PSII RC Štarko spektroskopijos rezultatai. Skaičiavimų palyginimas su eksperimentiniais duomenimis pateiktas 2 pav. Modeliavimas buvo atliktas į modelį įtraukus arba $\text{Chl}_{\text{D1}}^+ \text{Pheo}_{\text{D1}}^-$ arba $\text{P}_{\text{D2}}^+ \text{P}_{\text{D1}}^-$ CT būseną, o jos parametrai

buvo gauti derinant suskaičiuotus ir eksperimentinius spektrus. Matyti, kad skaičiavimai su $\text{Chl}_{\text{D1}}^+ \text{Pheo}_{\text{D1}}^-$ būsena duoda rezultatus artimesnius eksperimentiniams. Be to, skaičiavimai be jokių CT būsenų (mėlynos brūkšninės linijos 2 pav.) duoda kur kas blogesnius rezultatus nei skaičiavimai su bent viena CT būsena. Skaičiavimai su dviem CT būsenomis parodė, kad kai kurios spektro vietos geriau, o kai kurios – blogiau sutampa su eksperimentiniais rezultatais.



1 pav. Pigmentų ir kitų kofaktorių išsidėstymas PSII RC.



2 pav. PSII RC Štarko spektroskopijos rezultatai esant 77 K temperatūrai. Juodi apskritimai žymi eksperimentinius duomenis (paimitus iš šaltinio), raudona linija žymi skaičiavimus, kai į modelį įtraukta a) $\text{Chl}_{\text{D1}}^+ \text{Pheo}_{\text{D1}}^-$ CT būsena, b) $\text{P}_{\text{D2}}^+ \text{P}_{\text{D1}}^-$ CT būsena, c) abi CT būsenos.

Reikšminiai žodžiai: fotosintezė, antroji fotosistema, reakcijų centras, spektroskopija

Literatūra

[1] R. E. Blankenship, *Molecular Mechanisms of Photosynthesis*, 2nd edition (Wiley Blackwell, Chichester, 2014).

[2] A. Gelzinis, L. Valkunas, F. D. Fuller, J. P. Ogilvie, S. Mukamel, D. Abramavičius, Tight-binding model of the photosystem II reaction center: application to two-dimensional electronic spectroscopy, *New J. Phys.* **15**, 075013, 2013.

[3] A. Gelzinis, D. Abramavičius, L. Valkunas, Absorption lineshapes of molecular aggregates revisited, *J. Chem. Phys.* **142**, 154107, 2015.