

Влияние белкового окружения на динамику S_2 - S_1 внутренней конверсии лютеина в LHCII растений

Поддубный В. В., Козлов М. И.

Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, Москва, Россия

LHCII – основной светопоглощающий комплекс растений. В его состав входят хромофоры, которые можно разделить на 2 типа: хлорофиллы (a и b) и каротиноиды (лютеин, неоксантин и виолоксантин), поглощающие свет с длиной волны около 670 и 450 нм, соответственно. При возбуждении каротиноидов (лютеина, в частности) они переходят во второе электронное возбужденное состояние S_2 , и далее энергия с них переносится на хлорофиллы. Однако с этим процессом конкурирует внутренняя конверсия [1] – переход в состояние S_1 . Дальнейшая конверсия S_1 - S_0 на лютеине (LUT 620) играет важную роль в процессе нефотохимического тушения флуоресценции в комплексе LHCII [2]. На примере растворов было показано, что скорость внутренней конверсии каротиноидов достаточно сильно зависит от их окружения [3]. В связи с этим возникает вопрос, о том, как на скорости этих процессов влияет белковое окружение в рассматриваемом комплексе.

В работе представлены результаты моделирования диссипативной динамики указанных процессов с участием лютеина (LUT 620) в комплексе LHCII и динамики внутренней конверсии лютеина в растворе. Поскольку в ходе электронных переходов каротиноидов происходит и изменение его колебательных состояний, для расчета динамики был использован метод, разработанный нами ранее [4] способный описывать эти особенности. Параметры модели были рассчитаны с помощью высокоточных методов квантовой химии.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 18-33-01122.

1. P.J. Walla *et al.* // J. Phys. Chem. A, 2002, V. 106, P. 1909–1916.
2. A.N. Macpherson, T. Gillbro // J. Phys. Chem. A 1998, V. 102, P. 5049–5058.
3. R.Goss, B. Lepetit // J. Plant Physiol., 2015, V. 172, P. 13–32.
4. V.V. Poddubnyy *et al.* // J. Phys. Chem. B, 2017, V. 121, P. 10639–10647.