

ЛОКАЛИЗАЦИЯ «ЗАЦЕНТРОВЫХ» МОЛЕКУЛ ХЛОРОФИЛЛА В МОНОМЕРЕ И ТРИМЕРЕ ФОТОСИСТЕМЫ 1

Пищальников Р.Ю., Разживин А.П.¹

Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН, Россия, 119991, Москва,
ул. Вавилова, д. 38, +7(499)503-8783, rpishchal@kapella.gpi.ru

¹НИИ физико-химической биологии имени А.Н.Белозерского МГУ, Россия, 119991,
Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 40, НИИФХБ МГУ, +7(495)939-54-13,
razjivin@belozersky.msu.ru

Проведено моделирование миграции энергии возбуждения в пигмент-белковом комплексе фотосистемы 1 (ФС-1) цианобактерий. Расчеты выполнены для мономерной и тримерной форм ФС-1. Пространственная структура мономера ФС-1 была взята из базы данных белков (Protein Data Bank <http://www.rcsb.org/pdb>). На основе структуры мономера были проанализированы некоторые варианты формирования тримера ФС-1. Для мономера и тримера рассчитаны экситонные структуры возбужденных состояний. На основе моделирования спектров оптического поглощения, кругового и линейного дихроизма, а также кинетических кривых «накачки-зондирования» были вычислены энергии взаимодействия между молекулами хлорофилла внутри прицентрального комплекса, периферических антенных комплексов Lhca и Psa. Энергии Q_y перехода мономерных хлорофиллов были оценены с помощью метода дифференциальной эволюции, являющегося разновидностью генетических алгоритмов поиска оптимальных решений. Процедуры были распараллелены с использованием библиотеки MPI. Вычисления проводились на суперкомпьютере «Ломоносов» МГУ.

В результате анализа теоретических данных были идентифицированы группы молекул хлорофилла, которые соответствуют возбужденным состояниям с энергиями меньше энергии реакционного центра P700 («зацентровые» формы хлорофилла).

Расчетные данные сравниваются с полученными нами ранее экспериментальными данными для цианобактерии *Arthrospira platensis* [1].

Литература

1. *Kompanets V. et al.* Red chlorophyll excitation dynamics in *Arthrospira platensis* photosystem I trimeric complexes as studied by femtosecond transient absorption spectroscopy // *FEBS Letters* **Vol. 588**, No. 35, 2014, Pp. 341-344.