

НОВЫЙ ВЗГЛЯД НА ПРИРОДУ ПЕРЕНОСА ЭЛЕКТРОНА В ДИССИПАТИВНОЙ БЕЛКОВОЙ СРЕДЕ (НА ПРИМЕРЕ РЕАКЦИОННЫХ ЦЕНТРОВ ПУРПУРНЫХ БАКТЕРИЙ).

Глебов И.О.

Химический факультет МГУ имени М.В.Ломоносова, кафедра физической химии

Процессы переноса электрона играют одну из ключевых ролей в фотосинтезе. Первичные световые стадии переноса отличаются высокой скоростью и эффективностью. Важную и не до конца выясненную роль в подобных процессах играет белковое окружение донора и акцептора, которое не только рассеивает энергию, выполняя функции термостата, но также способно влиять на направление и выход отдельных стадий переноса электрона. Именно поэтому адекватное описание динамики возможно только при учете взаимодействия молекул хромофоров с белковым окружением. Общепринятой для подобных расчетов является теория Редфилда. Ее применение к простейшими фотосинтетическим организмам, таким как пурпурная бактерия *Rh. Sphaeroides*, позволяет достичь согласия с данными фемтосекундного эксперимента [1]. Перенос электрона в реакционном центре этой бактерии до сих пор рассматривался как электронно-колебательный процесс, происходящий в результате движения волнового пакета вдоль координаты реакции в системе двух взаимодействующих электронных термов. Проблемой такого подхода является использование феноменологических параметров, не имеющих четкого физического смысла и не связанных явно со структурой реакционной системы.

Однако, проведенные нами квантово-химические расчеты высокого уровня показали, что в изучаемом процессе координата реакции отсутствует, т.е. никакое движение ядер не приводит к переносу электрона в *Rh. Sphaeroides* и процесс является чисто электронным. В такой системе перенос электрона оказывается возможным только за счет взаимодействия с белковым окружением. Этот факт, который противоречит общепринятой модели, заставляет еще раз обратить внимание на роль белкового окружения в элементарных стадиях фотосинтеза.

Предложенная нами новая модель, основанная на квантовохимических расчетах, не противоречит экспериментальным данным по фемтосекундной динамике переноса электрона. Наличие осцилляций в фемтосекундных спектрах может быть объяснено участием дополнительных близлежащих электронных состояний или тем, что динамика имеет немарковский характер [2].

[1] Novoderezhkin V.L., Yakovlev A.G., Grondelle R. van, Shuvalov V.A. // J. Phys. Chem. B. 2004. V. 108. P. 7445-7457.

[2] В.В. Поддубный, И.О. Глебов, В.В. Еремин. // Теоретическая и математическая физика, 178(2):295–304, 2014.