

ОПТИКА И СПЕКТРОСКОПИЯ

УДК 577.37

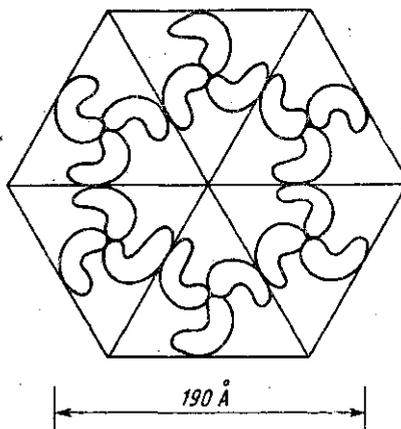
КИНЕТИКА ФЛУОРЕСЦЕНЦИИ ДЛЯ ДВУХ МОДЕЛЕЙ ОРГАНИЗАЦИИ СВЕТОСОБИРАЮЩЕЙ МАТРИЦЫ

Е. Л. Елисеева, А. К. Кукушкин

(кафедра биофизики)

Методом матриц вероятностей с учетом современных данных о структуре светособирающих комплексов фотосистемы II высших растений проведен расчет кинетики флуоресценции для двух моделей с разной организацией хлорофилл-белковых комплексов. Для обеих моделей получены одноэкспоненциальные кривые затухания для открытого и закрытого реакционных центров. Время жизни флуоресценции в случае закрытого центра в 1,5—2,8 раза больше, чем в случае открытого центра.

Первичные процессы фотосинтеза включают в себя высокоэффективное поглощение световой энергии и быстрый транспорт этой энергии к реакционным центрам (РЦ). Структурная организация пигмент-белковых комплексов и пути транспорта энергии в настоящее время до конца не выяснены. Однако существуют экспериментальные данные [1, 2], которые показывают, что единицей светособирающего комплекса (ССК) фотосистемы II является белковый тример, состоящий из трех мономеров, расположенных вокруг оси симметрии 3-го порядка. Элементарная ячейка содержит два противоположно ориентированных тримера. Шесть тримеров образуют круг диаметром 190 Å; внутри круга находится пустое пространство диаметром около 68 Å [1] (рис. 1). В работе [3] предложена модель структурной организации фотосистемы II, в соответствии с которой ССК представляет собой 6 тримеров, образующих гексагональную структуру. В ее внутреннем пространстве помещен ядерный пигмент-белковый комплекс (ПБК), содержащий 1 РЦ. Мономеры, из которых состоит тример ССК, содержат по 4 молекулы Хл *a*, сосредоточенных в центре тримера, и 3 молекулы Хл *b*, расположенных



на периферии. ПБК II может содержать 5 кластеров по 4—6 молекул Хл *a* в каждом, при этом центральный кластер представляет собой РЦ.

Рис. 1. Гексагональная структура ССК, образованная белковыми тримерами

Целью настоящей работы является расчет кинетики флуоресценции фотосистемы II с учетом имеющихся структурных данных. Кривые затухания получены методом матриц вероятностей с учетом флуоресценции и времени жизни на узлах.

Способ учета флуоресценции в методе матриц вероятностей был предложен в работе [4]. Интенсивность флуоресценции на *q*-том шаге $I \sim F(q) - F(q-1)$, где

$$F(q) = \left(\sum_{i=1}^M (p_{i, M+1})^q \right) / M \text{ для случая, когда в начальный момент времени распределение возбуждения по пигментам равновероятное. Здесь } M \text{ — число узлов в решетке, } (p_{i, M+1})^q \text{ — элементы } M+1\text{-го столбца матрицы вероятностей в степени } q \text{ (} M+1 \text{ — номер «флуоресцентной» ловушки). Диагональные элементы матрицы вероятностей равны нулю, что подразумевает равное для всех узлов время жизни на узлах. Если узел состоит из нескольких молекул пигмента и их количество для разных узлов неодинаково, то следует ввести ненулевые диагональные элементы. Тогда, если время жизни } t \text{ на узлах } k, n \text{ такое, что } t_n > t_k, \text{ то соответствующие диагональные элементы матрицы вероятностей равны: } p_{kk} = 0; p_{nn} = 1 - t_k/t_n.$$

96

Согласно [3] пигменты в ССК и ПБК II организованы в кластеры. Расстояние между пигментами в кластере $\sim 12\text{--}16 \text{ \AA}$, взаимодействие между ними сильное. Расстояние между кластерами $\sim 30\text{--}40 \text{ \AA}$, и они взаимодействуют слабо. При этих условиях возбуждение, попав в кластер, распределится по молекулам пигмента гораздо быстрее, чем успеет перескочить в следующий кластер. Критерий выделения таких квазисостояний разработан в работе [5] для случая переноса электронов в комплексах молекул переносчиков и может быть использован для случая миграции энергии. Выделение квазисостояний (кластеров) оправданно в случае, когда вероятность остаться в данном кластере за один проход по всем пигментам $k_1/(k_1+m_1) \cdot \dots \cdot k_r/(k_r+m_r)$ близка к единице. Здесь m_i — константа скорости выхода из квазисостояния, k_i — константа скорости перехода в состояние, принадлежащее данному квазисостоянию. Для рассматриваемой системы при всех i $m_i \sim 1/R_1^6$, где $R_1 \sim 30\text{--}40 \text{ \AA}$, $k_i \sim 1/R_2^3$, где $R_2 \sim 12\text{--}16 \text{ \AA}$, следовательно, вероятность остаться в кластере будет близка к единице. Таким образом, с хорошей точностью мы можем рассматривать кластеры в качестве узлов решетки.

Рассмотрим два случая возможного расположения кластеров молекул Хл *a*, представленных на рис. 2 и 3. Флуоресценция Хл *b* в эксперименте практически не наблюдается [6], следовательно, миграция с Хл *b* может рассматриваться как дополнительное возбуждение.

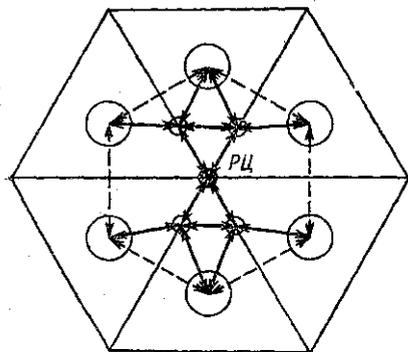


Рис. 2

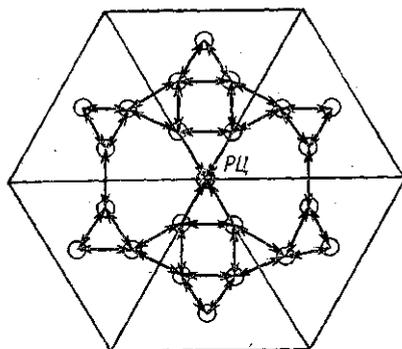


Рис. 3

Рис. 2. Схема № 1 возможного расположения кластеров пигментов в фотосинтетической единице фотосистемы II. Большие круги — кластеры из 12 пигментов, маленькие — кластеры из 4 пигментов. Штриховыми линиями обозначена менее вероятная миграция между тримерами, сплошными линиями — наиболее вероятные пути миграции

Рис. 3. Схема № 2 возможного расположения кластеров пигментов в фотосинтетической единице фотосистемы II. Кругами обозначены кластеры, содержащие 4 молекулы пигмента, стрелками — наиболее вероятные пути миграции

Первая модель предполагает, что в центре каждого тримера ССК находится один кластер из 12 молекул Хл *a*, а ПБК II содержит 5 кластеров по 4 молекулы в каждом, один из которых — РЦ (рис. 2). Так как количество пигментов в кластерах разное, необходимо ввести время жизни на узлах. В узле из N пигментов это время пропорционально N [7], следовательно, диагональные элементы матрицы вероятностей для кластеров в тримерах равны $2/3$, для кластеров в ПБК II — нулю. Вторая модель представляет собой систему из 23 кластеров, расположенных таким образом, что в каждом мономере содержится кластер из 4 молекул Хл *a* (рис. 3). Кластеры в ПБК II расположены так же, как и в модели 1.

Для обеих моделей численно получены одноэкспоненциальные кривые затухания для полностью открытого и полностью закрытого центра. Расчеты проводились при двух значениях вероятности высвечивания из каждой молекулы $\alpha = 0,01$ и $0,005$. Из кривых можно определить число актов миграции (прыжков), соответствующих уменьшению флуоресценции в e раз, т. е. времена τ_F и τ_{FM} жизни флуоресценции при открытом и закрытом РЦ. Результаты расчетов приведены в таблице, из которой видно, что время τ_{FM} превышает τ_F в 1,5—2,8 раза в зависимости от модели и ве-

Модель	α	τ_{F_0}	τ_{F_M}	τ_{F_M}/τ_{F_0}	Время прыжка, пс	
					длинного	короткого
1	0,01	7	12	1,7	200	70
	0,005	9	25	2,8	160	55
2	0,01	17	25	1,5	28	
	0,005	27	54	2,0	14	

роятности высвечивания. Эти результаты находятся в хорошем согласии с результатами экспериментов [8—10] для компоненты флуоресценции с временем жизни 500 пс и, следовательно, не требуют для своего объяснения введения дополнительных механизмов тушения. Исходя из полученных данных, можно также оценить характерное время переноса возбуждения между кластерами. Рассмотрим сначала модель 2. Так как расстояния между кластерами в ней везде одинаковы, время одного прыжка легко вычисляется и равно 28 пс для $\alpha=0,01$ и 14 пс для $\alpha=0,005$. В модели 1 расстояния между кластерами в тримерах (см. рис. 2, пунктирные линии) примерно в 2 раза больше, чем расстояния между кластерами, соединенными на рис. 2 сплошными линиями. Следовательно, вероятность миграции между тримерами в 64 раза меньше, чем вероятность миграции по сплошным линиям. Поэтому основной вклад в число прыжков дает миграция по направлению к ПБК II и внутри него. В этом приближении для $\alpha=0,01$ время переноса энергии составляет 70 пс. Время миграции энергии между тримерами оказывается равным 200 пс в соответствии с разным временем жизни в тримерах и кластерах ПБК II. Для $\alpha=0,005$ эти времена соответственно равны 55 и 160 пс.

Таким образом, на основании известных структурных данных мы построили две решетки кластеров пигментов для фотосистемы II и рассчитали для них кинетику флуоресценции. Полученные результаты могут быть полезны для дальнейшего выяснения структуры фотосистемы II.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Lyon M. K., Unwin P. N. T. // *J. Cell. Biol.* 1988. 106, N 5. P. 1515. [2] Kühnbrandt W. // *J. Mol. Biol.* 1988. 202, N 4. P. 849. [3] Тетенькин В. Л. Дис. ... канд. биол. наук. М. (МГУ), 1988. [4] Мелихова Е. М., Кукушкин А. К. // *Биофизика*. 1985. 30, № 5. С. 807. [5] Pearlstein R. M. // *Photochem. Photobiol.* 1982. 35, N 6. P. 835. [6] Рубин А. Б., Шинкарев В. П. Транспорт электронов в биологических системах. М., 1984. [7] Орт Д., Говинджи, Уитмарш Дж. и др. // *Фотосинтез*. Т. I. М., 1987. [8] Holzwarth A. R. // *Photochem. Photobiol.* 1986. 43, N 6. P. 707. [9] Berens S. J., Schelle J., Butter W. L., Magde D. // *Ibid.* 1985. 42, N 1. P. 51. [10] Hodges M., Moya I. // *Biochim. et Biophys. Acta.* 1986. 849, N 2. P. 193.

Поступила в редакцию
26.06.90