

Молекулярное моделирование растворимости хлорофиллов в водно-спиртовых смесях

Научный руководитель – Стегайлов Владимир Владимирович

Игольников Егор Игоревич

Студент (бакалавр)

Московский физико-технический институт, Москва, Россия

E-mail: igolnikov.ei@phystech.edu

Хлорофилл является основным пигментом, который поглощает свет в видимом диапазоне и передает его энергию для фотосинтеза. Несмотря на начало исследования механизма межхлорофильной передачи энергии ещё в 1950 году [1], задача остаётся очень актуальной и востребованной и по сей день [2]. Предположительно, именно конформации хлорофиллов играют большую роль в этом процессе. В строении молекулы хлорофилла есть углеводородный хвост, проявляющий гидрофобные свойства, и порфириновое кольцо с магнием по центру, частично отвечающее за гидрофильные свойства. Поэтому в воде молекулы хлорофилла агрегируют между собой, образуя устойчивые конформации, а в клетках растений они располагаются в гидрофобной внутренней части мембраны тилакоидов. Экспериментально была измерена интенсивность спектра флуоресценции хлорофилла в растворе воды и этанола при разных концентрациях [3]. Обнаружен резкий спад интенсивности флуоресценции при концентрации воды свыше 65%. Это связано с изменением конформаций молекул хлорофилла в растворе - образованием димеров. В работе проводится атомистическое моделирование пары молекул хлорофилла в водно-спиртовой смеси при разных концентрациях растворителей. Рассматривается динамика состава и формы гидратной оболочки за время моделирования. Анализируется связь гидратной оболочки и конформаций хлорофиллов в растворе. Исследуется зависимость расстояния между атомами магния в процессе динамики от концентрации растворителей. Максимум плотности на графике его распределения смещается влево с ростом концентрации воды. С помощью анализа радиальной функции распределения расстояния между атомами магния определены характерные расстояния связывания в воде и соответствующие им конформации димера. Взаиморасположение колец согласуется с взаимодействием самих порфиринов [4]. Также проведено метадинамическое исследование конфигурационного пространства димера в воде по расстоянию между магниями и хвостами молекул. Два минимума энергии соответствуют пикам радиальной функции и характерным конформациям. Изучен процесс перехода между ними и определена соответствующая конфигурация димера. Результаты работы согласуются с экспериментом [3] и позволяют лучше понять взаимодействие молекул хлорофилла между собой и с растворителем.

Источники и литература

- 1) W. F. Watson, R. Livingston, Self-Quenching and Sensitization of Fluorescence of Chlorophyll Solutions / J. Chem. Phys. 1950, 18, 802–809
- 2) T. P. J. Krüger et al, The role of energy losses in photosynthetic light harvesting / J. Phys. B: Atomic, Mol. Opt. Phys., 2017 50, 132001
- 3) R. S. Vladkova, Chlorophyll as a self-assembly in polar solvent-water mixtures/ Photochemistry and photobiology J., 2000, 71 - 83
- 4) Elmanova A., et al. Catching the π -Stacks: Prediction of Aggregate Structures of Porphyrin / The Journal of Physical Chemistry A. 2024