

MD-Simulationen Chlorophyllhaltiger Systeme

Untersuchung von Blaulichtpfaden in chlorophyllhaltigen Proteinen: Projektteil Moleküldynamik

O. Lemke, J. P. Götze, Institut für Chemie und Biochemie — Physikalische und Theoretische Chemie, Freie Universität Berlin

Kurzgefasst

- MD-Simulationen Chlorophyllhaltiger Systeme
- Vergleich Carotenoidhaltiger und Carotenoidfreier Systeme
- Untersuchung der Abhängigkeit der Absorptionsspektren von der Konformation des untersuchten Systems
- Bestimmung der strukturellen Eigenschaften des wasserlöslichen Chlorophyllproteins (WSCP)

Auf Basis von moleküldynamischen Simulationen soll der Konformationsraum verschiedener Chlorophyllhaltiger Proteine untersucht werden. Diese Konformationen können unter Anderem als Basis für die Berechnung von Absorptionsspektren in unterschiedlichen chemischen Umgebungen verwendet werden, um Prozesse, in denen Chlorophylle involviert sind, besser zu verstehen und zu vergleichen. Des weiteren sollen die dynamischen Eigenschaften der Proteine untersucht werden um die Aufnahme, die Stabilisierung sowie die Energieübertragung der Chlorophylle in den jeweiligen Proteinen zu verstehen.

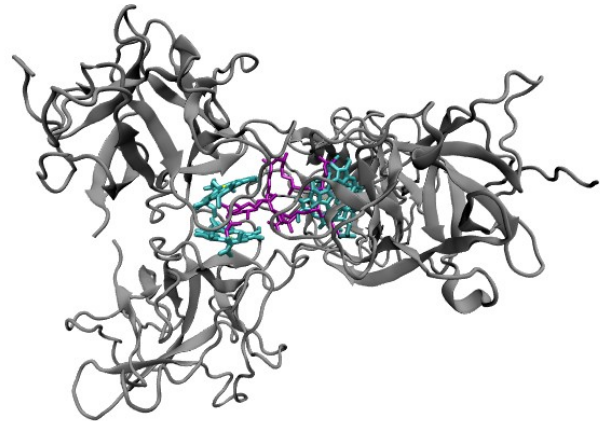


Abbildung 2: Wasserlösliches Chlorophyllprotein. Chromophore eingefärbt wie in der Abbildung für LHCII. Die Phytylketten sind in lila dargestellt.

Der Antrag umfasst drei Systeme, die aktuell im Rahmen eines DFG-geförderten Projektes (Projektnummer 393271229) untersucht werden; namentlich den Lichtsammelkomplex II (LHCII) (Abbildung 3), den kleinen Komplex CP29 (Abbildung 1) und das wasserlösliche Chlorophyllprotein (WSCP) (Abbildung 2). Diese Protein-Pigment-Komplexe unterscheiden sich in ihrer Struktur und Chromophorzusammensetzung. Ein Vergleich der Dynamik und der daraus resultierenden Spektren wird Rückschlüsse auf die zugrundeliegende Photophysik und die Proteinumgebung erzeugten Unterschiede erlauben. Ziel ist es, die Eigenschaften von Carotenoidhaltigen Systemen (LHCII/CP29) mit denen von Carotenoidfreien (WSCP) zu vergleichen. Hierbei wird besonders auf den möglichen Energietransfer zwischen blauen Absorptionsbanden geachtet, was in der bisherigen Forschung stark vernachlässigt wurde.

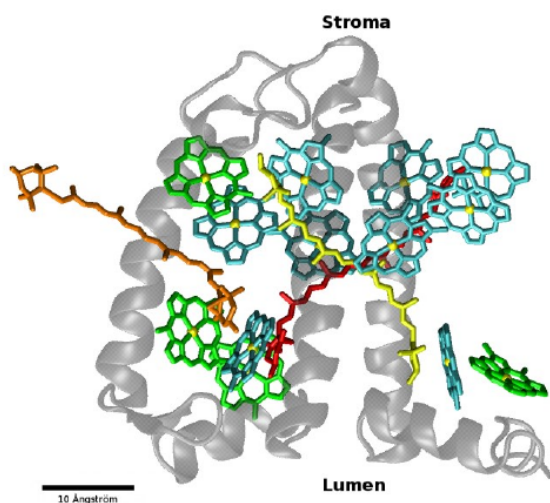


Abbildung 1: CP29 Komplex. Chromophore eingefärbt wie in der Abbildung für LHCII

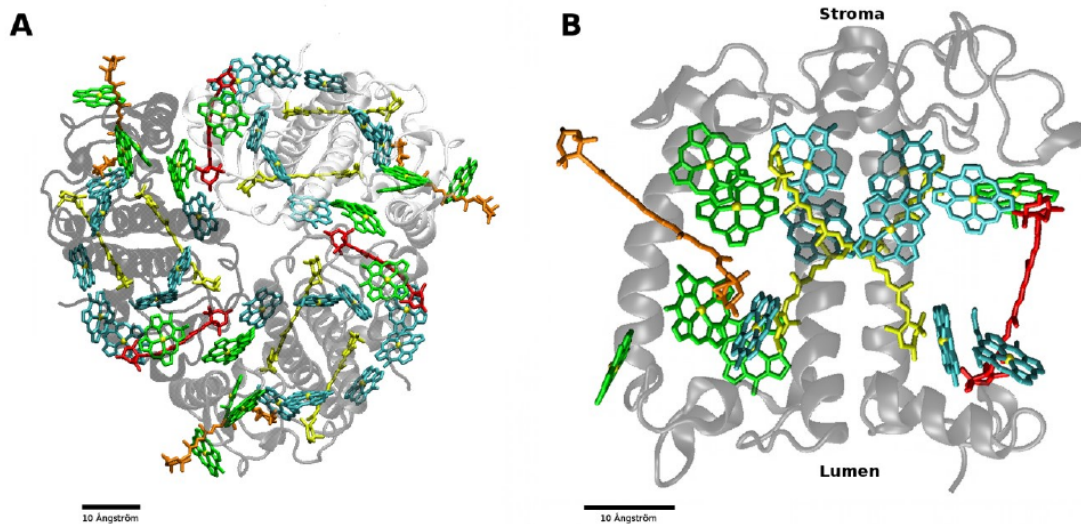


Abbildung 3: Lichtsammelkomplex II (*Pisum sativum*). A: Trimer, B: Monomer. Chromophore eingefärbt (Chl a: cyan, Chl b: grün, Lutein: gelb, Neoxanthin: orange, Violaxanthin: rot)

WWW

<http://www.jgoetze.userpage.fu-berlin.de/>

Weitere Informationen

- [1] D. Kröner, J. P. Götze, *J. Photochem. Photobiol. B* **109**, 12–19 (2012). doi: 10.1016/j.jphotobiol.2011.12.007
- [2] J. P. Götze, D. Kröner, S. Banerjee, B. Karasulu, W. Thiel, *ChemPhysChem* **15**, 3392–3400 (2014). doi:10.1002/cphc.201402233
- [3] J. P. Götze, B. Karasulu, M. Patil, W. Thiel, *BBA Bioenergetics* **1848**, 1509–1517 (2015). doi: 10.1016/j.bbabi.2015.07.011

Förderung

DFG Projektnummer 393271229, DFG SFB 765 - Multivalenz