

## СПИН-ИЗОМЕРЫ H<sub>2</sub>O В РЕАКЦИОННОМ ЦЕНТРЕ ФОТОСИНТЕЗИРУЮЩИХ ПУРПУРНЫХ БАКТЕРИЙ

Р.Ю.Пищальников, С.М.Першин, А.Ф.Бункин

Научный Центр Волновых Исследований ИОФРАН им А.М.Прохорова,  
119991, Россия, Москва, ул. Вавилова 38, *E-mail*: rpishchal@kapella.gpi.ru

Предложен механизм модуляции кинетики населённости возбуждённого состояния специальной пары P\* реакционного центра пурпурных бактерий на первой стадии разделения заряда, обнаруженный в экспериментах накачка-зондирование фемтосекундными импульсами в интервале до 3 пс. Две молекулы воды, расположенные в пространстве между специальной парой, молекулами гистидинов L173 и M202 и БХл Ва и Вб, рассматриваются здесь как спин-изомеры с отличающимися магнитными свойствами: орто-H<sub>2</sub>O и пара-H<sub>2</sub>O. Характерные частоты модуляции кинетики отнесены нами к вращательным резонансам и термам квантовых состояний орто-изомера H<sub>2</sub>O [1]. Полученное соответствие позволило предложить взаимодействие вращающегося магнитного момента орто-H<sub>2</sub>O, как вентиля процесса переноса заряда, и электрона, обеспечивающее модуляцию кинетики. Для этого в гамильтониан системы были включены слагаемые с характерными энергиями вращательных состояний орто-изомера H<sub>2</sub>O. Решение уравнения Лиувилля для матрицы плотности проводилось с учетом этих состояний. При этом релаксационные процессы и ширины экситонных линий моделировались в рамках теории Редфилда для молекулярных агрегатов [2].

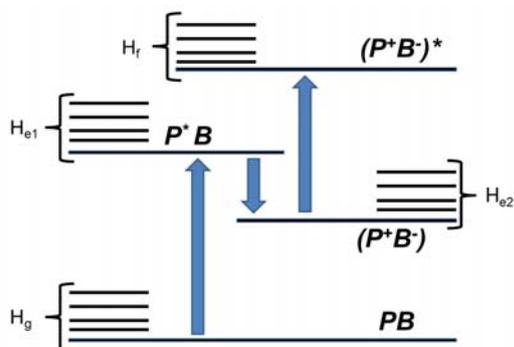


Рис.1. Схема уровней энергии, соответствующая состояниям с разделёнными зарядами PB, P\*B, P+B- и P+(B-)\* в РЦ, где H<sub>g</sub>, H<sub>e1</sub>, H<sub>e2</sub> и H<sub>f</sub> – гамильтонианы возбуждённых состояний вращательных и колебательных уровней. Стрелками обозначены основные переходы, задействованные в эксперименте зондирования и накачки

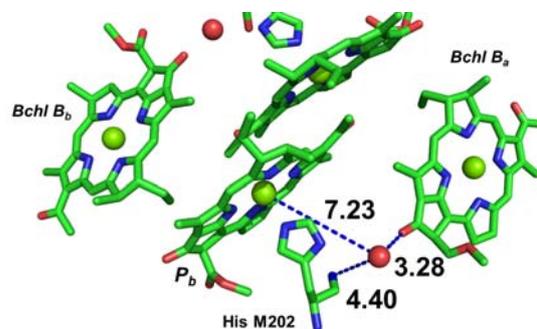


Рис.2. Расположение молекул специальной пары и БХл Ва и Вб, молекулы H<sub>2</sub>O и гистидина His M202 в РЦ. Цифрами обозначены расстояния в ангстремах между молекулой H<sub>2</sub>O и ближайшими атомами окружения

## SPIN-ISOMERS OF H<sub>2</sub>O IN THE REACTION CENTER OF PHOTOSYNTHETIC PURPLE BACTERIA

R.Y. Pishchalnikov, S.M. Pershin, A.F. Bunkin

Wave Research Center, Prokhorov General Physics Institute, Russian Academy of Science, 38 Vavilov Street, Moscow 119991, Russia

### Литература

1. S.M.Pershin and R.Yu.Pishchalnikov. // Physics of Wave Phenomena, 2012, 20, 35-44.
2. V.I.Novoderezhkin, A.G.Yakovlev, R.van Grondelle, and V.A.Shuvalov. // Journal of Physical Chemistry B, 2004, 108, 7445.