

Влияние колебательной релаксации на фемтосекундную динамику переноса электрона в реакционных центрах фотосинтетических бактерий.

Глебов И.О.

студент

Химический факультет МГУ, г. Москва, Россия

glebov_io@mail.ru

Фемтосекундная динамика переноса электрона в реакционных центрах фотосинтеза – предмет интенсивных исследований, как теоретических, так и экспериментальных. Важным явлением, наблюдаемым уже в фемтосекундной области, является потеря когерентности, объясняемая взаимодействием с окружением и диссипацией колебательной энергии. Целью нашей работы является изучение влияния колебательной релаксации на динамику переноса электрона в реакционных центрах фотосинтетических бактерий.

Предметом исследований был выбран модифицированный реакционный центр, в котором перенос электрона с мостика на акцептор заблокирован. Несмотря на всю сложность рассматриваемой биологической системы, на ранних временных интервалах она может быть описана с помощью одномерной модели с диссипацией. В этой модели состояния донора и мостика описываются двумя смещенными одномерными гармоническими осцилляторами, и учитывается влияние окружения как набор колебательных мод, взаимодействующих с двухуровневой системой.

Расчет в данной работе состоит из двух частей: расчета характеристик двухуровневой системы и учета влияния окружения (использовалась теория Редфилда – учет взаимодействия системы и окружения во втором порядке теории возмущений, приближение Маркова). Исходная редуцированная матрица плотности задавалась соответствующая узкому волновому пакету, набор мод термостата считался непрерывным, взаимодействие с термостатом однофононным.

Исследовано влияние параметров взаимодействия системы с термостатом (параметры спектральной функции, амплитуда взаимодействия) на временную эволюцию редуцированной матрицы плотности. В качестве расчетных величин использовались заселенность отдельных диабатических состояний и средняя энергия волнового пакета. Для анализа потери когерентности и нарушения исходной колебательной структуры проведены расчеты матричного элемента когерентно движущегося волнового в редуцированной матрице плотности $\sigma(t)$.

В работе рассмотрены три случая взаимодействия с термостатом:

- 1) термостат взаимодействует с обоими состояниями[1]
- 2) термостат взаимодействует только со вторым состоянием (или взаимодействует с первым пренебрежимо мало), что может быть объяснено различным значением дипольного момента до и после переноса электрона[1].
- 3) термостат взаимодействует с первым состоянием, переход во второе состояние не происходит[2].

Для третьего случая было показано аналитически экспоненциальное убывание энергии.

Для первого и второго случаев были проведены численные расчеты при разных значениях параметров взаимодействия с термостатом, которые показали, что:

- в первом случае скорость потери когерентности и переноса энергии от системы к термостату увеличивается при повышении температуры термостата, интенсивности взаимодействия и эффективной частоты термостата;

- во втором случае имеется немонотонная зависимость, которая может быть объяснена снижением вероятности перехода при включении взаимодействия только во втором состоянии.

1) И.О. Глебов, В.В. Еремин. Журнал Физ. Химии, в печати, 2007

2) В.В. Еремин, И.О. Глебов. Теор. Мат. Физика, в печати, 2007