



**FORSCHUNGSPROJEKT**

„Die Wege des Lichts“

**RIAN RICHTER, INGO SCHELTER & JOHANNES FÖRSTER**

Elitestudiengang Biological Physics

Universität Bayreuth, Dezember 2018

## Die Wege des Lichts

Rian Richter, Ingo Schelter und Johannes Förster studieren und arbeiten in den Bereichen Theoretische Physik und Bioinformatik bei Prof. Stephan Kümmel und Prof. Matthias Ullmann an der Universität Bayreuth. Sie beschäftigen sich im Rahmen einer interdisziplinären Zusammenarbeit im Elitestudienprogramm "Biological Physics" mit der first-principles Beschreibung von Energietransferprozessen in bakteriellen Lichtsammelsystemen.

### Energiegewinnung nach dem Vorbild der Natur

Die direkte Nutzung von Sonnenenergie ist ein vielversprechender Ansatz für die Energieversorgung der Zukunft, zumal es in der Natur zahlreiche Organismen gibt, die diese Quelle seit Millionen von Jahren erfolgreich nutzen. Ein frühes Beispiel bilden Purpurbakterien, die Licht im grünen und nahen Infrarotspektrum absorbieren und in chemische Energie umwandeln. Die Absorption von Licht und der anschließende Energietransfer zu einem Reaktionszentrum sind dabei extrem effizient. Das Ziel dieses Forschungsprojekts ist es, diesen Prozess auf molekularer Ebene mit Hilfe von Computersimulationen im Detail zu verstehen.

### Abstieg in die Quantenwelt

Für die Absorption von Licht und den Energietransfer im Lichtsammelsystem von Purpurbakterien sind Pigmente verantwortlich, hier Bakteriochlorophyll-a, die geordnet in ringförmige Proteine eingebettet sind (s. Bild) [1]. Die Pigmente werden durch das einfallende Licht elektronisch angeregt. Die teils starke Kopplung der Pigmente sowohl untereinander als auch mit dem Proteingerüst sorgt dabei einerseits für die Feinabstimmung der Absorption und andererseits für die hohe Effizienz des Energietransfers sowohl innerhalb eines Pigment-Protein-Komplexes als auch zwischen benachbarten Komplexen.

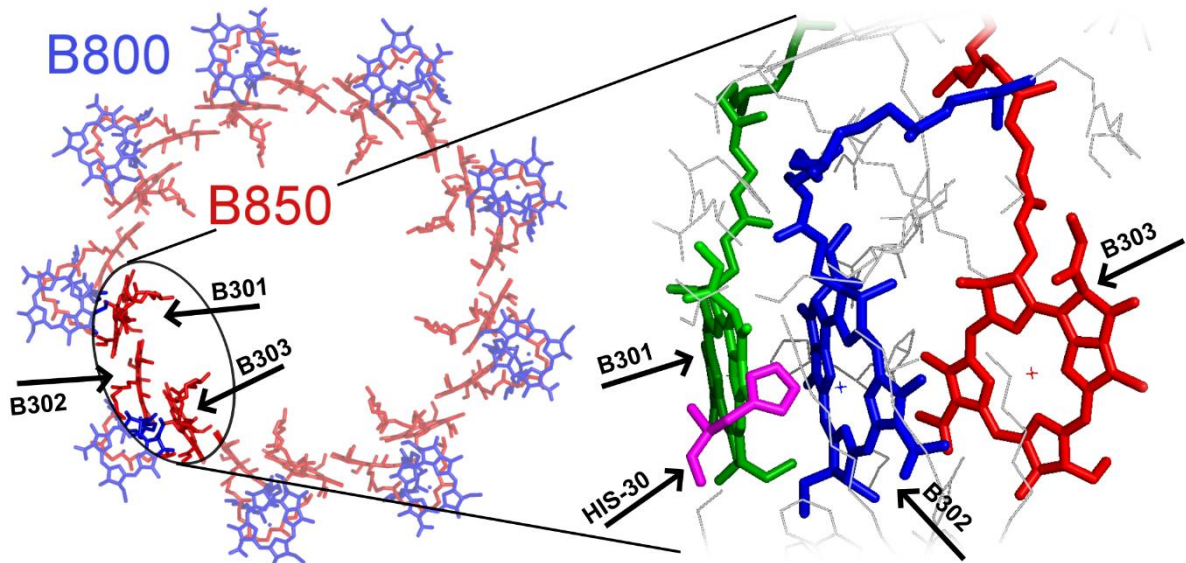
In diesem Forschungsprojekt beschreiben und simulieren wir diese elektronischen Prozesse von first-principles, also ohne Modellannahmen oder empirische Parameter, als quantenmechanisches Vielteilchenproblem. Die große Zahl von mehreren Tausend Atomen und Elektronen, die alle miteinander wechselwirken, macht diese Herangehensweise allerdings zu einer Herausforderung. Für unsere Rechnungen verwenden wir zeitabhängige Dichtefunktionaltheorie (TDDFT), die in vielen Bereichen etabliert ist. Speziell die numerische Umsetzung auf sog. Realraum-Gittern und in Realzeit ist für die Beschreibung großer Systeme geeignet [2]. Allerdings benötigt man einen genäherten Ausdruck für die Beschreibung der komplizierten, quantenmechanischen Austausch- und Korrelations-Wechselwirkungen (XC) der Elektronen. Diese XC-Näherung kann sowohl die Rechenzeit als auch die Qualität der Ergebnisse stark beeinflussen.

### Die Wege des Lichts

Die hoch aufgelöste Struktur der Proteine und Pigmente, die wir als Ausgangspunkt für unsere Simulationen nehmen, sind aus Kristallstrukturanalysen bekannt [3]. Als erstes Beispiel für einen Energietransfer betrachten wir zunächst vier Pigmente zusammen mit den nächstliegenden Teilen des Proteins. Die übrigen Teile des Komplexes beschreiben wir durch ein elektrostatisches Potential. Dieses Potential hat einen

Einfluss auf die Absorption der Pigmente und hilft uns dabei, die Kopplung der Pigmente richtig zu beschreiben.

Im Rahmen unserer Simulation erzeugen wir eine Anregung auf einem der vier Pigmente durch einen simulierten Laserpuls. Anschließend betrachten wir die dadurch hervorgerufene Fluktuation der Elektronendichte. Diese verwenden wir als Maß für eine Art Energiedichte, um zu bestimmen, in welchem Zeitraum die Energie vom angeregten Pigment zum gegenüberliegenden Pigment wandert. In unserem Beispiel mit vier Pigmenten dauert dieser Transfer ca. 50 fs. Um in Zukunft aussagekräftige Ergebnisse zu erhalten, müssen wir die Kopplung der Pigmente untereinander und an das Proteingerüst besser verstehen und beschreiben, fortgeschrittene XC-Näherungen entwickeln und verwenden sowie die thermische Bewegung im System berücksichtigen.



Links: Zwei Ringe aus 9 (B800) und 18 (B850) Bakteriochlorophyllen innerhalb eines Pigment-Protein-Komplexes (LH2).  
Rechts: Ein Ausschnitt mit drei Bakteriochlorophyllen (B301-B303) und Teilen des Proteins in nächster Umgebung (hervorgehoben: Histidin HIS-30).  
Rechte: Copyright 2018 Ingo Schelter

#### Literatur:

- [1] Cogdell R. J., Gall A., Köhler J. "The architecture and function of the light-harvesting apparatus of purple bacteria: from single molecules to in vivo membranes", Q.Rev.Biophys. 39, pp. 227-324 (2006)
- [2] Schelter I., Kümmel S. "Accurate Evaluation of Real-Time Density Functional Theory Providing Access to Challenging Electron Dynamics", J.Chem.Theory.Comput. 14, pp. 1910-1927 (2018)
- [3] McDermott G., Prince S. M., Freer A. A., Hawthornthwaite-Lawless A. M., Papiz M. Z. "Crystal structure of an integral membrane light-harvesting complex from photosynthetic bacteria", Nature 374, pp. 517-521 (1995)

Mehr zum Elitestudiengang „Biological Physics“:

🔗 <http://www.biophys.enb.uni-bayreuth.de>