

Physik der Photosynthese

Wie Bakterien die Quantenphysik ausnutzen, um effizient Photosynthese zu betreiben

Thorsten Ritz und Klaus Schulten

In biologischen Zellen arbeiten komplizierte, auf Nanoskalen konstruierte Apparate, die in der Kombination von Effizienz, Anpassungsfähigkeit und Zuverlässigkeit bislang unübertroffen sind. Durch Fortschritte in der Strukturauflösung kann die moderne Biophysik erklären, wie biologische Zellfunktionen und die zugrundeliegenden physikalischen Prozesse auf atomarer Skala ablaufen. Ein Paradebeispiel dafür ist der Apparat, mit dem Purpurbakterien das Sonnenlicht „ernten“: Seine klare molekulare Architektur und die enge Verbindung von quantenmechanischen Prozessen mit einer biologischen Funktion demonstrieren besonders anschaulich, dass Lebewesen ihre Eigenschaften letztendlich den Gesetzen der Physik verdanken, und dass dieser Umstand mit dem gleichen Anspruch an Genauigkeit und Logik aufgeklärt werden kann, den Physiker bislang an die Erklärung inorganischer Prozesse gelegt haben.

Organismen, die Photosynthese betreiben, können chemische Energie aus Sonnenlicht gewinnen. Durch Absorption von Sonnenlicht werden Farbstoffmoleküle – Chlorophylle oder Carotenoide – elektronisch angeregt. Diese Anregung wird in mehreren Schritten zu einem „Reaktionszentrum“ geleitet und dort durch Ladungsübertragung in ein elektrostatistisches Potential und letztendlich in die Synthese von ATP, den Treibstoff der Zelle, umgemünzt. Das Reaktionszentrum wird zusammen mit den Proteinen, welche die Farbstoffmoleküle enthalten, als Lichtsammelapparat bezeichnet. Er bildet das biologische Pendant zu einer Photozelle, funktioniert sehr effizient und ist besonders anpassungsfähig. Im Lichtsammelapparat wird die absorbierte Lichtenergie innerhalb von 100 ps und mit einer Quantenausbeute von 95% in elektrische Energie umgewandelt. Einerseits verhindern Schutzmechanismen, dass der Organismus bei starker Lichteinstrahlung durch überschüssige Energie geschädigt wird, andererseits stellt der Lichtsammelapparat unter dauerhaft schwacher Lichteinstrahlung aber hinreichend Energie zur Verfügung. Was sind nun die Mechanismen und Strategien, mit denen Organismen diese Funktionalität erreichen?

Ein Schlüssel zum Verständnis liegt in der Entdeckung, dass der Lichtsammelapparat nicht aus zahlreichen Kopien von Reaktionszentren besteht, sondern

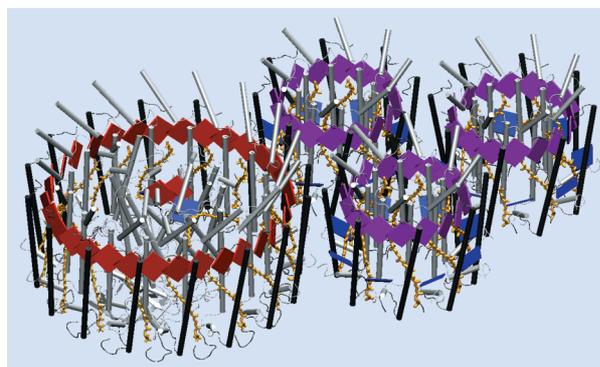


Abb. 1: Der Lichtsammelapparat bildet das biologische Pendant zur Photozelle. Er besteht aus Reaktionszentrum (rot) und in der Nähe angeordneter, kreisförmiger Lichtsammelkomplexe. Eine Proteinumgebung (schwarze bzw. weiße Säulen) bildet das Gerüst zur Organisation der Farbstoffmoleküle: Carotenoide sind in gelb, die Bakteriochlorophyll-Moleküle entsprechend ihrer drei Absorptionsmaxima in blau, purpur und rot dargestellt (siehe Abb. 3).

eine Kombination aus Reaktionszentren und mit Farbstoffen angefüllten Proteinen ist. Durch diesen Aufbau ergeben sich Möglichkeiten, den Fluss der Energie zu kontrollieren. Um diese Kontrollmechanismen zu verstehen, muss zunächst geklärt werden, wie die Energie zwischen Farbstoffmolekülen übertragen wird.

Ein wichtiger Beitrag zu dieser Frage wurde durch den Physikochemiker Theodor Förster erbracht, der zeigte, dass elektronische Anregung von einem Donormolekül durch einen inkohärenten strahlungslosen Streuprozess auf ein Akzeptormolekül übertragen werden kann, sofern die Anregungszustände von Donor und Akzeptor in Resonanz sind [1]. Die Resonanzbedingung muss dabei exakt eingehalten werden, da die Kopplung zwischen Donor und Akzeptor schwach ist. Försters Verdienst war es, für den Übergang zwischen optisch erlaubten Zuständen (d. h. Zuständen, die zu Absorption und Emission fähig sind) die Rate der Anregungsübertragung mit den beobachteten spektralen Eigenschaften der beteiligten Moleküle in Verbindung zu bringen. Seine Gleichung wird heute vielfach angewendet, um den geometrischen Abstand zwischen Farbstoffmolekülen durch Messung der Energietransferrate sowie der Absorptions- und Emissionsstärke der Farbstoffe zu bestimmen.

Heute, fünfzig Jahre später, sind die Strukturen aller Komponenten des Lichtsammelapparates von Purpur-

Dipl.-Phys. Thorsten Ritz (ritz@ks.uiuc.edu) und Prof. Dr. Klaus Schulten (kschulte@ks.uiuc.edu), Department of Physics, Beckman Institute for Advanced Science and Technology, University of Illinois, 405 N. Mathews Ave, Urbana, IL 61801, USA, www.ks.uiuc.edu

bakterien in atomarer Auflösung bekannt. Die Struktur des Reaktionszentrums (RZ) wurde durch Röntgenstrukturanalyse bestimmt und zeigt, dass nur vier Bakteriochlorophyll-Moleküle (BChl-Moleküle) in einem RZ vorhanden sind. BChl-Moleküle außerhalb des RZ sind in so genannten Lichtsammelkomplexen LH1 und LH2 organisiert.

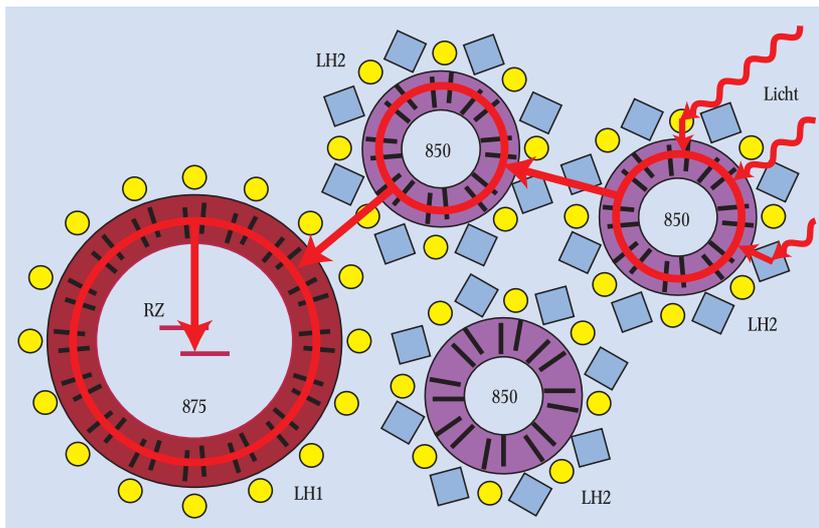


Abb. 2: Schema des Lichtsammelapparates. Einfallendes Licht kann von Carotenoiden (gelb), B800-BChl-Molekülen (blau) oder BChl-Ringen (B850: purpur, B875: dunkelrot) absorbiert werden. Die Anregungsenergie wird von den LH2-Antennenkomplexen über den LH1-Komplex an das Reaktionszentrum geleitet.

In LH1 sind 24 bis 32 Bakteriochlorophylle und 12 bis 16 Carenoide in einem Ring oder Ringfragment um das RZ angeordnet. Die Bakteriochlorophylle werden dabei als B875-Bakteriochlorophylle bezeichnet, gemäß ihrem Absorptionsmaximum bei 875 nm. Die Struktur von LH1 wurde auf der Basis von elektronenmikroskopischen Daten modelliert. In einigen Spezies umgeben zusätzliche LH2-Antennenkomplexe den LH1-Komplex. Die Struktur von LH2 ist durch Röntgenstrukturanalyse für zwei Purpurbakterien aufgelöst worden. In LH2 von *Rhodospirillum (Rs.) molischianum* formen sechzehn B850-Bakteriochlorophylle einen überlappenden Ring, wobei ihre Molekülebenen senkrecht zur Membranebene angeordnet sind [2]. Ein weiterer Ring wird von den übrigen acht B800-BChl-Molekülen geformt, deren Molekülebenen parallel zur Membranebene liegen und die deutlich voneinander getrennt sind.

Die räumliche Anordnung der LH2-Komplexe um LH1 ist nicht bekannt. Die Struktur eines minimalen Lichtsammelapparats aus einem LH1 und drei LH2 ist in Abb. 1 und das zugehörige Schema in Abb. 2 gezeigt. Die Abstände zwischen den Komplexen wurden durch Modellbildung bestimmt [3].

Die Molekülgeometrien in atomarer Auflösung enthalten ein ungleich komplizierteres Bild als von Förster behandelt wurde, der davon ausging, dass alle Farbstoffe im Lichtsammelsystem als isolierte, identische Moleküle vorliegen. Wie in Abb. 3 gezeigt, gibt es vielmehr drei Arten von Farbstoffen. Nur ein kleiner Teil der Farbstoffe liegt als isolierte BChl-Moleküle vor, der größere Teil ist in Ringen dicht gekoppelter Bakteriochlorophylle organisiert. In dichtem Kontakt mit isolierten BChl-Molekülen und BChl-Ringen liegt eine

dritte Art von Farbstoffen vor, die Carenoide.

Mit diesem neuen Bild hunderter hierarchisch angeordneter Farbstoffe waren wiederum Physiker gefordert, die elektronischen Zustände der Farbstoffe und den Mechanismus der Anregungsübertragung zwischen den Farbstoffen quantenmechanisch auf Basis der bekannt gewordenen Geometrien zu beschreiben. Die Ergebnisse dieses Forschungsprogramms wollen wir im Überblick darstellen. Dazu folgen wir dem Weg eines Photons durch den Lichtsammelapparat (Abb. 2), und erläutern Schritt für Schritt, welche quantenphysikalischen Konzepte eine Rolle spielen, um die jeweilige biologische Funktion zu kontrollieren. Theorie und Experiment haben gemeinsam in einer fruchtbaren Wechselwirkung zum heutigen Verständnis beigetragen. Neuartige experimentelle Methoden, die bei der Untersuchung des Photosyntheseapparates eine wichtige Rolle spielen, sind u. a. die Hole-Burning-Spektroskopie, die zeitaufgelöste Spektroskopie im Femtosekundenbereich, die nichtlineare Absorptionsspektroskopie, die hochauflösende Emissionsspektroskopie, sowie die Einzelmolekülspektroskopie [4–6]. Die angewendeten theoretische Methoden reichen von der Bioinformatik und Strukturanalyse bis zur Molekulardynamik, der Quantenchemie, der Theorie stark korrelierter Elektronensysteme und der stochastischen Quantenmechanik.

Einfangen von Photonen

Die isolierten B800-Bakteriochlorophylle in LH2 sind am weitesten vom Reaktionszentrum entfernt. Da die Geometrien und Spektren der BChl-Moleküle bekannt sind, kann man Försters Gleichung anwenden, um die Energieübertragungszeit von B800 zu einzelnen B850-BChl-Molekülen zu bestimmen. Überraschenderweise ist die gemessene Zeit (700 fs) um eine Größenordnung kürzer als durch die Förstersche Gleichung vorhergesagt (7,2 ps). Wodurch bewerkstelligt das Bakterium diese Beschleunigung? Wie Rechnungen zeigen, liegt der Schlüssel in den Quantenzuständen der B850-BChl-Ringe [7, 8]. Durch die starken Wechselwirkungen zwischen den BChl-Molekülen entstehen Exzito-

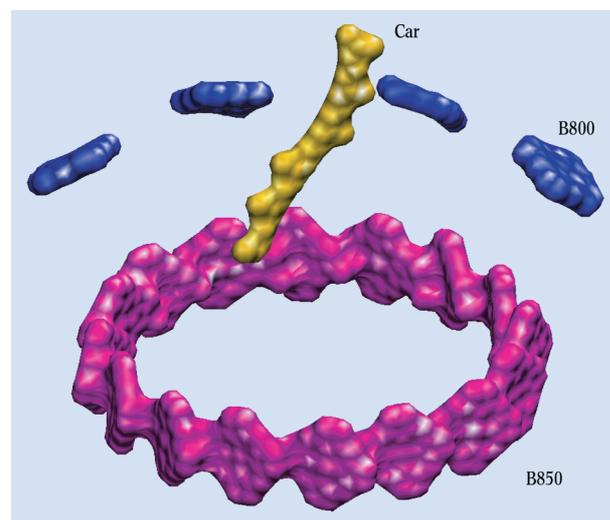


Abb. 3: Optisch aktive Elektronensysteme der Farbstoffe in LH2 von *Rs. molischianum*. B800-BChl-Moleküle (blau) sind voneinander getrennt, während die Elektronensysteme der sechzehn B850-BChl-Moleküle (purpur) einen überlappenden Ring bilden. Carotenoiden (gelb) befinden sich in engem Kontakt mit B800- und B850-Molekülen. Von den acht B800-BChl-Molekülen und acht Carotenoiden in LH2 sind nur vier bzw. eines dargestellt.

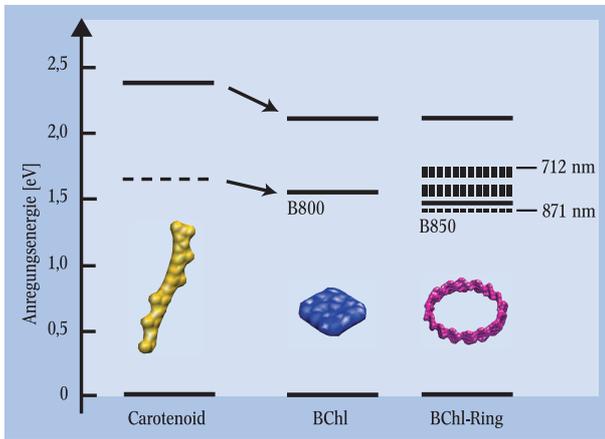


Abb. 4: Energiezustände der Farbstoffe im Photosyntheseapparat. Volle Linien bezeichnen optisch erlaubte Zustände, gestrichelte Linien optisch verbotene Zustände. Anregungsübertragung kann nur zwischen resonanten Energiezuständen erfolgen. In BChl-Ringen verbreitern zahlreiche optisch verbotene Exzitonenzustände den Resonanzbereich des B850-Bandes.

nen, d. h. gebundene Elektronen-Loch-Paare. Zwei dieser Exzitonenzustände absorbieren Licht bei 850 nm, weitere, optisch verbotene Exzitonenzustände liegen im Bereich von 871 nm bis 712 nm (siehe Abb. 4). Die energetisch höheren Exzitonenzustände sind dabei viel besser in Resonanz mit den B800-BChl-Molekülen als die Exzitonenzustände bei 850 nm. Dadurch wird die Übertragung $B800 \rightarrow B850$ beschleunigt. Nachdem Energie in das Exzitonensystem eingespeist ist, stellt sich schnell ein Gleichgewicht ein, in dem, gemäß der Boltzmann-Verteilung, nur die niedrigsten Exzitonenzustände besetzt sind. Damit stehen die höherliegenden Exzitonenzustände nicht mehr zur Verfügung und die Rückübertragung $B850 \rightarrow B800$ wird drastisch verlangsamt. B800-Bakteriochlorophylle speisen damit ihre Energie fast vollständig in das B850-System ein. Sie arbeiten also als Hilfsfarbstoff, der den Spektralbereich der Lichternte vom nahen infraroten zum roten Teil des Sonnenlichtes erweitert.

Lichtsammeln und Oxidationsschutz durch Carotenoide

Eine zweite Klasse von Hilfsfarbstoffen sind die Carotenoide (Car), die in einem gänzlich anderen Spektralbereich, nämlich um 500 nm, absorbieren. Wie kann eine Anregung von diesem hohen Energieniveau auf BChl-Zustände, die bei 850 nm und damit außerhalb der Resonanzbedingung liegen, übertragen werden? Bakterien nutzen dazu einen höherliegenden BChl-Zustand und einen niedrigliegenden Carotenoidzustand aus (siehe Abb. 4). Nach Absorption in den höherliegenden Zustand relaxiert die Anregung innerhalb von 200 fs in den niedrigliegenden Zustand, der in symmetrischen Carotenoiden optisch verboten ist. Er kann also weder absorbieren noch fluoreszieren.

Photosynthese betreibende Bakterien, in denen die Car-BChl-Kopplung effizient ist, sind in der Lage, Anregung in weniger als 10 ps von diesem optisch verbotenen Carotenoidzustand auf BChl-Moleküle zu übertragen [9]. Wie dies ablaufen sollte, blieb lange ein Rätsel. Wegen der geometrischen Nähe von Carotenoiden und BChl-Molekülen wurde spekuliert, dass Energie durch Elektronenaustausch übertragen wird [10]. Alternativ wurde vorgeschlagen, dass Energieübertrag

durch Coulomb-Wechselwirkung ermöglicht wird, da im Nahbereich die höheren Multipolmomente von Bedeutung sind. Abbildung 5 illustriert den Anregungsübertragungsmechanismus durch (a) die Coulomb- und (b) die Austausch-Wechselwirkung.

Quantenmechanische Rechnungen zeigen, dass nur die Coulomb-Wechselwirkung im Nahbereich und nicht die Elektronenaustausch-Wechselwirkung Anregungsübertragung im Picosekundenbereich ermöglicht. Die Coulomb-Wechselwirkung ist dabei im Allgemeinen für optisch erlaubte Zustände stärker als für optisch verbotene Zustände, d. h. höhere Multipolmomente spielen auch im Nahbereich keine dominante Rolle.

Um die elektronischen Eigenschaften der Carotenoidzustände zu erklären, müssen Korrelationseffekte zwischen den π -Elektronen in den linearen, konjugierten Systemen der Carotenoide berücksichtigt werden. Dabei stellt man fest, dass zwei Symmetrien bestimmen, ob ein Carotenoid-Zustand optisch erlaubt oder verboten ist, nämlich die C_{2h} -Symmetrie und die sogenannte „alternancy“ Symmetrie [11]. Carotenoide mit C_{2h} -Symmetrie bleiben bei 180° -Drehung um die molekulare Symmetrieachse unverändert (Abb. 6). Diese Symmetrie kann durch Torsionen und Verbiegungen durch die Proteinumgebung gebrochen werden. Weniger anschaulich ist die Grundlage der in Carotenoiden näherungsweise gültigen „alternancy“ Symmetrie. Sie beruht darauf, dass Carotenoide mit dieser Symmetrie näherungsweise in zwei disjunkte und äquivalente Gruppen von Atomen aufgeteilt werden können (Abb. 6). Die „alternancy“ Symmetrie wird gebrochen, indem die Äquivalenz der Atome durch funktionelle Seitengruppen oder eine polarisierende Proteinumgebung aufgehoben wird. Nur bei gleichzeitigem Brechen beider Symmetrien werden die Auswahlregeln für den niedrigliegenden Carotenoidzustand aufgehoben, wodurch dieser schwach erlaubt wird, was – wie oben erläutert – in einer stärkeren Kopplung zu BChl-Molekülen resultiert.

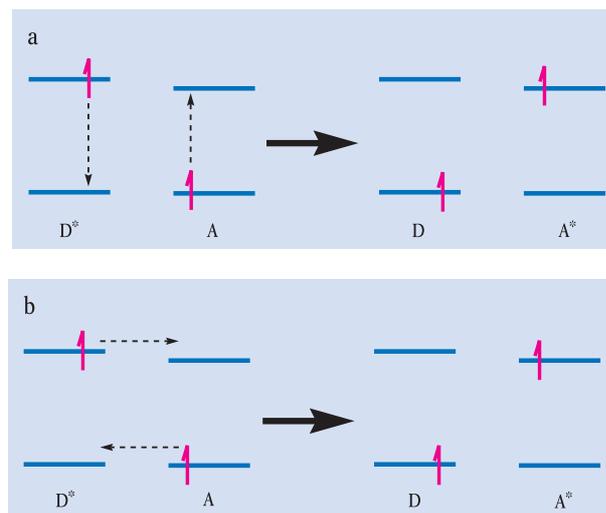


Abb. 5: Mechanismen für strahlungslose Anregungsübertragung $D^*A \rightarrow DA^*$ von einem Donormolekül D auf ein Akzeptormolekül A.
 ► a) Durch Coulomb-Wechselwirkung wird der Elektronenübergang vom angeregten (D^*) zum Grundzustand (D) im Donormolekül mit dem gleichzeitigen Elektronenübergang vom Grund- (A) zum angeregten Zustand (A^*) im Akzeptormolekül gekoppelt.
 ► b) Anregung wird durch Austausch von Elektronen zwischen Donor- und Akzeptormolekül übertragen.

Photosynthetische Organismen können durch die Wahl des Carotenoidfarbstoffes die Effizienz der Anregungsübertragung $\text{Car} \rightarrow \text{BChl}$ steuern. Je stärker die Symmetrien gebrochen werden, desto effizienter ist der Anregungsübertrag durch den niedrigliegenden Carotenoidzustand [9]. Polare Seitengruppen brechen die Symmetrien sehr stark, was u. a. im Lichtsammelapparat einer Seealgenart ausgenutzt wird, in dem das stark asymmetrische Carotenoid Peridinin der am häufigsten

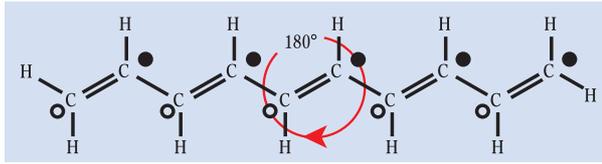


Abb. 6: Symmetrien im Carotenoid $\text{C}_{10}\text{H}_{20}$. C_{2h} -Symmetrie: Identität bei Drehung um 180° um die gezeigte Achse. „Alternancy“ Symmetrie: Die Atome lassen sich näherungsweise in zwei disjunkte, äquivalente Gruppen aufspalten, hier gekennzeichnet durch weiße und schwarze Scheiben.

vorkommende Farbstoff ist [12]. Eine weitere Steuerungsmöglichkeit ergibt sich durch die geometrische Anordnung von Carotenoiden und BChl-Molekülen. Wie Rechnungen für LH2 von verschiedenen Purpurbakterien zeigen, bestimmen Positionsunterschiede von weniger als 1 \AA , bei identischer chemischer Struktur der Carenoide, ob ihre Anregung vor allem zum B850-BChl-Ring oder zu B800-BChl-Molekülen übertragen wird [13].

Neben ihrer Funktion als Hilfsfarbstoffe haben Carotenoiden eine weitere, möglicherweise noch bedeutendere, Funktion. Sie schützen photosynthetische Organismen vor schädlichen Oxidationsprodukten. Normalerweise kann überschüssige elektronische Anregung in BChl-Molekülen in einen niedrigliegenden Triplettzustand relaxieren, von dem diese wiederum auf Sauerstoffmoleküle gemäß der Gleichung ${}^3\text{BChl}^* + {}^3\text{O}_2 \rightarrow {}^1\text{BChl} + {}^1\text{O}_2^*$ übertragen werden kann. Diese angereg-

ten Sauerstoffmoleküle ${}^1\text{O}_2^*$ haben eine stark oxydierende Wirkung. Carenoide verhindern die Entstehung des ${}^1\text{O}_2^*$ -Zustandes, indem sie die Anregung der BChl-Triplettzustände durch die Übertragung ${}^3\text{BChl}^* + {}^1\text{Car} \rightarrow {}^1\text{BChl} + {}^3\text{Car}^*$ in einen Carotenoid-Triplettzustand ${}^3\text{Car}^*$ „abfangen“, der energetisch zu niedrig liegt für eine Anregung von ${}^1\text{O}_2^*$.

Die Kopplung für den Prozess ${}^3\text{BChl}^* + {}^1\text{Car} \rightarrow {}^1\text{BChl} + {}^3\text{Car}^*$ erfolgt durch Austausch-Wechselwirkung [10]; entsprechende Rechnungen können die Schutzfunktion der Carenoide erklären [11].

Ein „See“ aus BChl-Anregungen

Carotenoiden wie B800-BChl-Moleküle speisen ihre Energie in die BChl-Ringe ein. Neben der bereits erwähnten Beschleunigung dieses Prozesses haben die Exzitonenzustände weitere funktionelle Eigenschaften. Im idealisierten Fall von ringförmigen LH2-Aggregaten sind nur die Exzitonenzustände bei 850 nm optisch erlaubt. Unterhalb dieses Paares liegt aber noch ein weiterer Exzitonenzustand bei 871 nm , der optisch verboten ist (siehe Abb. 4). Durch diese optischen Eigenschaften können die BChl-Ringe als kurzfristige Energiespeicher fungieren. Anregung von den höher gelegenen, erlaubten Exzitonenzuständen relaxiert in den tiefsten, optisch verbotenen Exzitonenzustand, wodurch Energieverluste durch Fluoreszenz minimiert werden.

Für den Energieübertragsprozess zwischen BChl-Ringen werden sowohl die optisch erlaubten als auch die optisch verbotenen Exzitonenzustände verwendet. Wie man aus Abb. 7 ersehen kann, sind die Zeiten für Hin- und Rückübertragung fast gleich. Auch hierfür sind die Exzitonenzustände verantwortlich. Der Energietransfer von einem isolierten B850-BChl zu einem isolierten B875-BChl-Molekül würde für die Rückübertragung τ_{\leftarrow} nicht zweimal, sondern gemäß $\tau_{\leftarrow} = \tau_{\rightarrow} \times e^{\Delta E/kT}$ bei Zimmertemperatur etwa sechsmal länger dauern als für die Hinübertragung. Bemerkenswert ist auch, dass die Rückübertragung vom Reaktionszentrum zum LH1-Ring schneller vorhergesagt wird als die Hinübertragung $\text{LH1} \rightarrow \text{RZ}$. Dadurch kann Anregungsenergie, die im RZ nicht in eine Ladungsübertragung umgesetzt wird, wieder in das System von BChl-Ringen eingespeist und im Idealfall zu einem anderen RZ geleitet werden oder aber in den BChl-Ringen in Wärme verwandelt werden, ohne das RZ selbst zu „verbrennen“.

Das System von RZ mit seinen umgebenden Farbstoffen ist oftmals als ein „Trichter“ beschrieben worden, in dem Farbstoffe energetisch höher liegen, je weiter sie vom RZ entfernt sind. Dieser Energietrichter, so die Argumentation, gewährleistet, dass Anregungsübertragung in Richtung des RZ immer schneller verläuft als in der Gegenrichtung. Die Zeiten für die Übertragung elektronischer Anregungen in diesem System, die in Abb. 7 zusammengefasst sind, zeigen, dass dieses Bild nur bedingt richtig ist. Hin- und Rücktransferzeiten zwischen BChl-Ringen sind nahezu gleich, was bedeutet, dass die Energie keineswegs vorwiegend in Richtung des RZ übertragen wird, sondern meist ungerichtet zwischen verschiedenen BChl-Ringen. Das System der BChl-Ringe und seine elektronischen Anregungen ist damit besser als ein „See“ beschrieben, aus dem die Reaktionszentren nur bei Bedarf Energie entnehmen. Bedingt durch die Funktion der BChl-Ringe als Energiespeicher gewährleistet ein derartiges System auch eine hohe Quantenausbeute. Unter dauerhaft

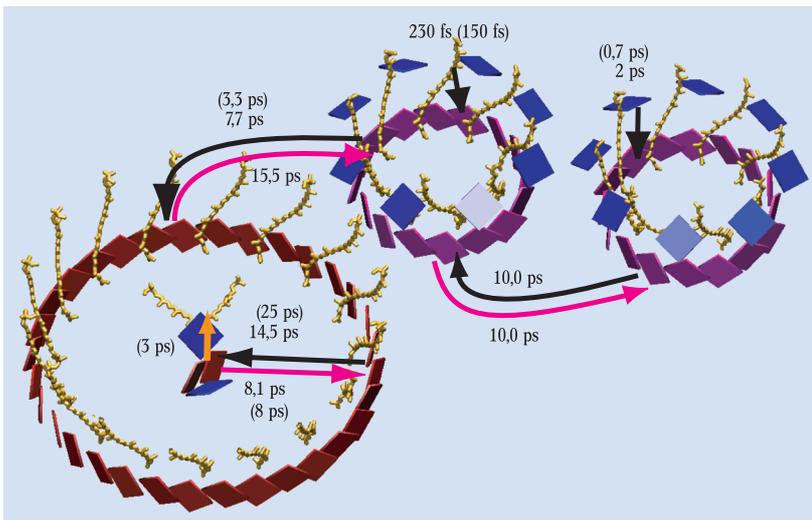


Abb. 7: Zeiten für Anregungsübertragungsprozesse zwischen den verschiedenen Farbstoffen im Photosyntheseapparat. Die Zeiten wurden durch quantenmechanische Rechnungen auf Grundlage der Strukturen bestimmt [13]. Sie sind für die Hin- und Rückübertragung zwischen BChl-Ringen nahezu gleich lang, d. h. die Energie wird meist ungerichtet zwischen den Lichtsammelkomplexen übertragen. In Klammern sind die gemessenen Übertragungszeiten zum Vergleich aufgeführt.

schwachen Lichtbedingungen allerdings wird das genetische Programm der Zelle umgeschaltet, und die Zelle konstruiert in der Tat einen „Trichter“, indem sie LH2 durch LH3-Komplexe ersetzt, in denen die Energie der BChl-Ringe bei 820 nm und nicht bei 850 nm liegt, sodass ein höheres Energiegefälle alle Anregungen zum RZ sendet.

Zuverlässigkeit trotz Schwankungen

Abbildung 7 fasst unser heutiges Verständnis des Photosyntheseapparates zusammen. Wir sind in der Lage, von der Struktur des Apparates durch quantenmechanische Rechnungen die Zeiten für Anregungsübertrag zwischen allen Pigmenten nahezu quantitativ vorherzusagen. Allerdings haben wir dabei bislang unberücksichtigt gelassen, dass der Photosyntheseapparat, wie jede biologische Maschine, unter physiologischen Temperaturen operiert und damit thermischen Fluktuationen unterworfen ist.

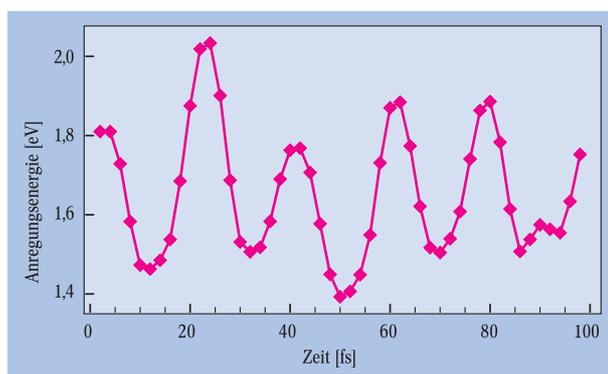


Abb. 8: Fluktuationen der Anregungsenergien eines B850-BChl-Moleküles. Das dargestellte Verhalten wurde aus klassischen Molekulardynamiksimulationen des B850-BChl-Systems im LH2-Komplex von *Rs. molischianum* ermittelt, die an quantenchemische Rechnungen der BChl-Anregungen gekoppelt wurden [14].

Intensive Diskussionen und Beobachtungen wurden durch die Frage provoziert, inwiefern die natürliche Unordnung durch thermische Bewegung die Eigenschaften der Exzitonen beeinflusst. Eine interessante Antwort geben jüngste kombinierte quantenmechanische und klassische Simulationsrechnungen am LH2-Komplex von *Rs. molischianum*. Abbildung 8 zeigt die zeitlichen Fluktuationen der lokalen Anregungsenergie der B850-BChl-Moleküle. Die Variation dieser Energie ist in der selben Größenordnung wie die Aufspaltung der Exzitonenzustände. Man erwartet demnach, dass die Anregungen der B850-BChl-Moleküle durch die in Abb. 8 gezeigten Fluktuationen voneinander entkoppelt werden und die Ringanregungen nicht auf den gesamten Ring von 16 BChl-Molekülen ausgedehnt, sondern vielmehr auf wenige BChl-Moleküle lokalisiert sind [14]. Eine komplette quantenmechanische Beschreibung der molekularen Schwingungen, ihrer Kopplung an die elektronischen Anregungen der BChl-Moleküle, sowie an die elektronische Kopplung zwischen den BChl-Molekülen im Rahmen des so genannten Polaronmodells ist zur Zeit in Bearbeitung [15].

Es bleibt zu klären, welchen Einfluss diese Fluktuationen auf die optischen Eigenschaften der BChl-Aggregate und auf die Energieübertragungsprozesse haben, und wodurch es einem photosynthetischen Organismus möglich ist, trotz dieser Schwankungen die

lebensnotwendigen Prozesse zu kontrollieren.

Thermische Bewegungen beeinflussen nicht nur das Lichtsammelsystem, sondern auch die Ladungsübertragungen im RZ [16, 17]. Alle molekularen Apparate biologischer Zellen bestehen aus relativ weichen Materialien und sind somit starken thermischen Einflüssen unterworfen. Wie können diese Apparate ihre Funktionen erfüllen, wenn eine genaue Anordnung der miteinander wechselwirkenden Teile und Reaktanden notwendig ist und quantenmechanische Interferenzeffekte, die durch kleine räumliche Verschiebungen beeinflusst werden können, vermieden werden müssen? Die Beantwortung dieser Frage ist eine der faszinierendsten Aufgaben der theoretischen Biophysik, welche ihrer intellektuellen Bedeutung und ihrem mathematischem Schwierigkeitsgrad nach keinem anderen Problem der modernen Physik nachsteht. Weit über das Verständnis der Funktionsweise der Photosynthese hinaus kommt dem Lichtsammelapparat der Purpurbakterien eine Schlüsselrolle für das Verständnis der Funktionsweise zellulärer Maschinen im Allgemeinen zu.

Dank

Alle Molekulargraphiken wurden mit Hilfe des Programmes VMD [18] erstellt. Die beschriebenen Untersuchungen wurden in der Theoretical Biophysics Group der University of Illinois, Urbana-Champaign, in Zusammenarbeit mit Ana Damjanović und Xiche Hu durchgeführt. Finanzielle Unterstützung kam von NIH, NSF und dem Roy J. Carver Trust.

Literatur

- [1] T. Förster, *Ann. Phys. (Leipzig)* **2**, 55 (1948)
- [2] J. Koepke et al., *Structure* **4**, 581 (1996)
- [3] X. Hu, A. Damjanović, T. Ritz und K. Schulten, *Proc. Natl. Acad. Sci.* **95**, 5935 (1998)
- [4] J. Amesz und A. J. Hoff, *Biophysical Techniques in Photosynthesis*, Kluwer, Dordrecht, 1996
- [5] D. Leupold, B. Voigt, W. Beenken und H. Stiel, *FEBS Letters* **480**, 73 (2000)
- [6] J. Köhler, *Phys. Bl.*, Januar 2000, S. 47
- [7] X. Hu, T. Ritz, A. Damjanović und K. Schulten, *J. Phys. Chem. B* **101**, 3854 (1997)
- [8] T. Ritz, X. Hu, A. Damjanović und K. Schulten, *J. Luminescence* **76**, 310 (1998)
- [9] T. Ritz et al., *Photosyn. Res.* (angenommen)
- [10] D. Dexter, *J. Chem. Phys.* **21**, 836 (1953)
- [11] A. Damjanović, T. Ritz und K. Schulten, *Phys. Rev. E* **59**, 3293 (1999).
- [12] A. Damjanović, T. Ritz und K. Schulten, *Biophys. J.* **79**, 1695 (2000)
- [13] T. Ritz, *The Quantum Physics of the Bacterial Photosynthetic Unit*, Dissertation, Universität Ulm, Ulm (2000)
- [14] I. Barvik, C. Warns, T. Neidinger und P. Reineker, *Chem. Phys.* **240**, 173 (1999)
- [15] A. Damjanović et al., eingereicht.
- [16] D. Xu und K. Schulten, *Chem. Phys.* **182**, 91 (1994)
- [17] B. McMahon, J. Müller, C. Wraight und G.-U. Nienhaus, *Biophys. J.* **74**, 2567 (1998)
- [18] W. F. Humphrey, A. Dalke und K. Schulten, *J. Mol. Graphics* **14**, 33 (1996)