



ESTUDIO TEÓRICO DE LA FORMACIÓN DE RADICALES CATIONICOS EN LOS COMPLEJOS FOTOSINTÉTICOS CAPTADORES DE LUZ

Felipe Aparicio¹, Heber Islas¹

¹Universidad Autónoma Metropolitana – Unidad Cuajimalpa; México
e-mail: fplatas@correo.cua.uam.mx

Los complejos captadores de luz (*light harvesting complexes* o LHC, por sus siglas en inglés) son sistemas moleculares que se encuentran en todos los organismos fotosintéticos. La principal función de estos complejos es captar la luz solar y transportar la energía obtenida hacia los centros de reacción, donde se desencadenan las reacciones bioquímicas del proceso fotosintético. Sin embargo, los LHC también participan en el proceso de disipación del exceso de energía luminosa, conocido como disipación no fotoquímica (*non-photochemical quenching* o NPQ, por sus siglas en inglés). En particular, se sabe que la transferencia electrónica y la formación de radicales cationicos de los pigmentos carotenoides son fenómenos que juegan un papel importante en el proceso NPQ de la bacteria fotosintética púrpura del azufre.¹

En este trabajo estudiamos el mecanismo de formación de los radicales cationicos en las moléculas de carotenoide de los complejos fotosintéticos LH-I y LH-II, de la bacteria púrpura del azufre. Los pigmentos estudiados fueron: neurosporeno, esferoideno, esferoidenon y espirilloxantino. El estudio se realizó usando la aproximación Tamm-Dancoff de la teoría de funcionales de la densidad dependiente del tiempo (TDDFT),² con el programa ORCA.³ Los resultados muestran que, en una escala de energías, la posición relativa de las energías de excitación de los estados S_1 de los pigmentos estudiados es determinante para la formación de los radicales cationicos en el complejo fotosintético LH-II, en mayor medida que en el complejo LH-I.

- (1) Müller, P.; Li, X.-P.; Niyogi, K.K. *Plant Physiol.* **2001**, 125, 1558.
- (2) Hirata, S.; Head-Gordon, M. *Chem. Phys. Lett.* **1999**, 314, 291.
- (3) Neese, F.. *Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Molecular Science.* **2012**, 2, 73.