

Estudio de la inducción de movimientos en rodopsina a partir de la fotoisomerización del retinal utilizando modelos de baja dimensionalidad.

Equipo de investigación: **Carlos Alberto Arango.**

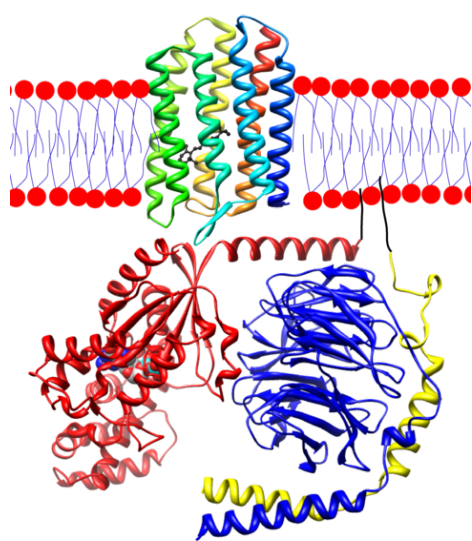
Asistentes de investigación:

Investigadores adscritos al Grupo de Investigación: **Natura**

Más información: caarango@icesi.edu.co

Antecedentes/Introducción/Problemática

El estudio de la dinámica en proteínas se hace por la mecánica clásica, mientras la dinámica en moléculas se debe de estudiar utilizando mecánica cuántica. Hay situaciones en las que una molécula actúa como iniciadora de los movimientos en una macromolécula o una proteína, estudiar este sistema conjunto molécula-proteína es de sumo cuidado. Por una parte, no se puede realizar un cálculo cuántico en un sistema de tal dimensionalidad, y por otra, estudiar la dinámica conjunta clásicamente sería inadecuado y no se obtendrían los efectos cuánticos de importancia en la molécula. El problema se vuelve aún más complejo cuándo la molécula es un cromóforo, que absorbe luz láser cuidadosamente preparada en intensidad y fase, con propósitos de controlar coherentemente la dinámica molecular y subsecuentemente la dinámica macromolecular.



Justificación

Se ha observado control coherente de fase en rodopsina, a pesar de que teóricamente se había mostrado que era imposible en el límite de baja intensidad. La tendencia actual es la simulación de este sistema utilizando métodos complejos QM/MM, que si bien podrían aportar resultados comparables al experimento, no aportan mucho conceptualmente.

Nuestra aproximación emplea sistemas simples, de baja dimensionalidad y con interacciones claramente definidas. Esto permite saber que pasa detalladamente para luego mapear la dinámica simplificada en el mundo de las moléculas reales. Igualmente, nuestra aproximación permite hacer enlace directo con un problema fundamental que es el de la decoherencia, y más importante, con el problema de la emergencia del mundo clásico a partir de lo cuántico.

Metodología/Herramientas/Modelo

1. Evaluaremos Hamiltonianos que ya existen en la modelación simplificada del retinal.
2. El entorno consistirá inicialmente de un conjunto de osciladores armónicos modelados cuánticamente y acoplados al retinal.
3. Para el acoplamiento emplearemos varias posibilidades que permitan la inducción de movimientos del entorno.
4. La radiación se estudiará en el límite lineal o de un fotón, explorando intensidades suficientemente bajas para garantizar que no estemos haciendo control de poblaciones en lugar de control coherente de fase.
5. Se probarán diferentes perfiles espectrales para los pulsos láser. Para los perfiles espectrales más adecuados se simularán diferentes funciones de fase buscando la controlabilidad de los movimientos del entorno (proteína).
6. Alternativa o paralelamente, desarrollaremos el mismo problema utilizando la metodología Hartree multidimensional dependiente del tiempo (MCTDH). La ventaja de esta metodología es la disposición de una herramienta muy poderosa, precisa y fácil de manejar como los códigos de H.D. Meyer (MCTDH paralelizable).

7. Finalmente y con miras a una segunda etapa del proyecto, buscamos igualmente implementar esta metodología en el formalismo spin-bosón, para lo cual ya estamos buscando interacción con grupos de información cuántica. Esto nos permitirá implementar una metodología ampliamente aceptada en un problema de gran importancia.

Gráfico 1. Probabilidad de excitación trans en el estado electrónico 2 empleando pulsos "chirpeados" positiva y negativamente.

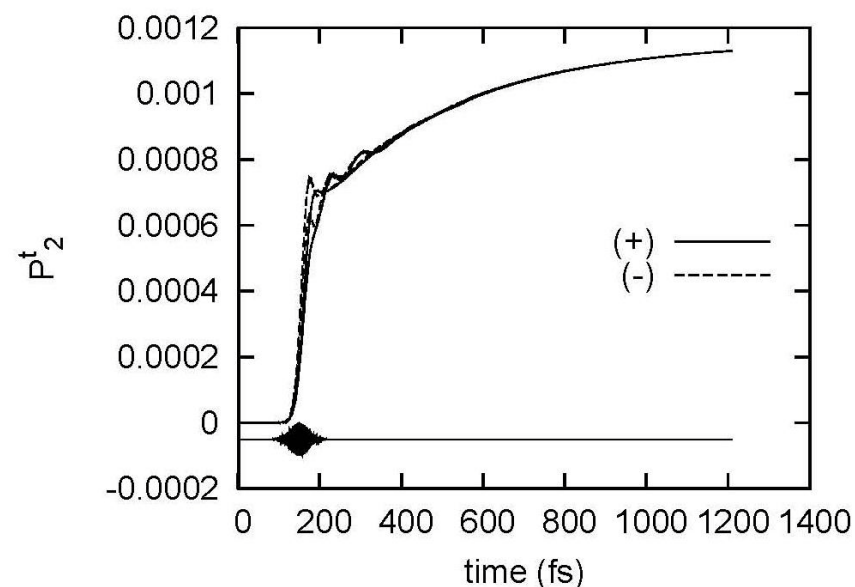
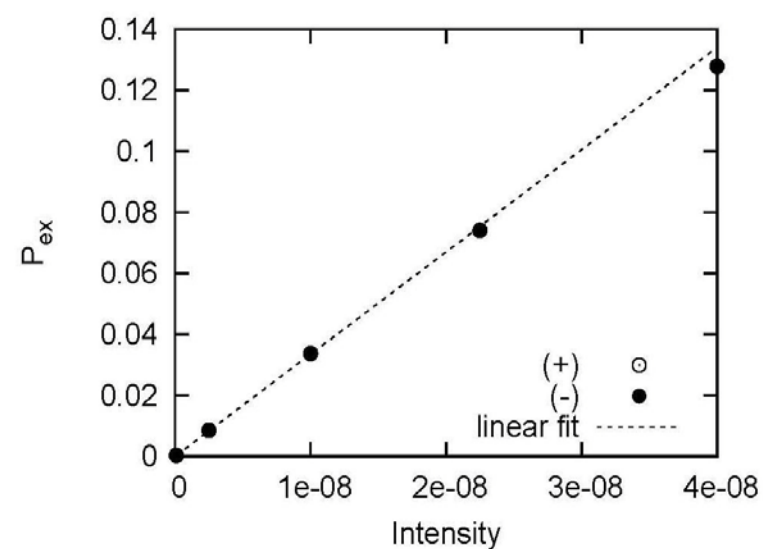


Gráfico 2. Régimen lineal de fotoexcitación con pulsos láser.



Resultados Esperados

1. Modelos matemáticos del sistema molecular, su entorno proteínico y la radiación que capten cualitativamente los resultados observados experimentalmente por Miller et al. en fotoisomerización experimental de rodopsina.
2. Reporte de resultados con los parámetros adecuados que logre explicar los efectos observados experimentalmente por Miller et al.
3. Elaboración de hasta tres manuscritos para someter a revistas del nivel del Journal of Chemical Physics, Chemical Physics, Journal of Physical Chemistry o Chemical Physics Letters.
4. Iniciar formalmente la interacción investigativa con el profesor Michael Thorwart de la Universidad de Dusseldorf con el objetivo de una futura implementación de la metodología spin-bosón para estudiar control coherente (de fase) en la inducción de movimientos macromoleculares a partir de fotoexcitación de baja intensidad. Con el profesor Thorwart tenemos vínculos a través de Cesar Mujica M.Sc., quien será su estudiante de doctorado en los próximos años y quien ha trabajado con nosotros en la Universidad.

Bibliografía/Principales Referencias

- S. Hahn and G. Stock. *Femtosecond secondary emission arising from the nonadiabatic photoisomerization in rhodopsin*. Chem. Phys., 259:297–312, 2000.
- V. I. Prokhorenko, A. M. Nagy, S. A. Waschuk, L. S. Brown, R. R. Birge, and R. J. D. Miller. *Coherent control of Retinal Isomerization in Bacteriorhodopsin*. Science, 313:1257–1261, 2006.
- M. Shapiro and P. Brumer, *Principles of the Quantum Control of Atomic and Molecular Processes*, Wiley, New York, 2003; S.A. Rice and M. Zhao, *Optical Control of Molecular Dynamics*, Wiley, New York, 2000.
- P. Brumer and M. Shapiro, Chem. Phys. 139, 221 (1989).