

# 紫色光合细菌 LH1 和 LH2 的激子能级结构(I)

—— 理论与模型

杨光参

(温州大学物理与电子信息学院, 浙江温州 325035)

**摘要:** 为了解紫色光合细菌 LH1 和 LH2 的可能的光谱性质, 解析地研究了二聚物环状链的激子能级结构. 在叶绿素分子间偶极子-偶极子相互作用的近似下, 利用偶极子间的相互作用能量和指向参数, 解析地给出了激子能级、带宽和两个 Davydov 子能带间的带宽. 提出的模型包括了系统中色素分子间所有的相互作用.

**关键词:** 光合作用; 捕光天线; 激子; 能级结构

**中图分类号:** O433    **文献标识码:** A    **文章编号:** 1006-0375(2007)01-0004-09

光合作用是地球上最重要的化学反应之一. 我们已经知道光合作用最初的活动是捕光天线(LHA)对光的吸收. 吸收的能量通过电子激发的运载, 被快速有效地转移到反应中心(RC). 在反应中心, 开始电荷分离, 这样光激发能就被转化成了化学能<sup>[1]</sup>. 在紫色细菌中, 光捕获天线是由一个围绕着反应中心的核心天线 LH1 和一个外围天线 LH2 组成. LH1 和 LH2 都呈现出高对称性结构, 它们是由一对细菌叶绿素连接在横跨膜多肽上构成的, 比如  $\sigma\beta$ -Bchl<sub>a</sub>2.

根据 B800-B850 复合体的结构信息, 我们可以合理的把 B850 内环看作一个的圆形链, 由于它们的对称性不同, 在圆形链中属于相同的  $\sigma\beta$  多肽对的两个细菌叶绿素构成了一个异质二聚体. 这种环的形式已经被引入到关于 LH1 和 LH2 的能谱性质及激子动力学的分析中<sup>[2-5]</sup>. 这些关于分子链的理论分析集中在最近邻近的情况下. 在线性链中, 细菌叶绿素间距离的增大导致了相互作用的急剧减弱, 此时上述的近似是比较适合的. 但对于一个较小的环链来说, 由于二聚物间的距离并没有随着指标差异的增加而增加, 更远一些的相互作用则必须被包括在内. 对于我们研究的紫色细菌的 LH1 和 LH2 来说, 他们的尺度可以和毗邻的细菌叶绿素间的距离相比较. 因此, 考虑到紫色光合细菌的 LH1 和 LH2 的光学属性, 包含所有的相互作用是非常有必要的. 我们现在的工作就是通过考虑所有的色素分子的相互作用来描述这种二聚物环状分子聚合体的激子能级和光谱性质. 值得强调的是, 我们采用了一个解析近似的方法来研究激子的属性, 因此所有的结果都可以使用解析的方法得到. Hu 等人最近公布的研究也认为二聚物环的光谱属性要包括所有的相互作用<sup>[6]</sup>. 他们建立了一个有效的哈密尔顿函数并且导出了关于激子能带边缘的公式, 而相互作用包括在几个参数中.

收稿日期: 2007-01-09

作者简介: 杨光参(1964-), 男, 浙江宁海人, 教授, 博士, 研究方向: 生物物理, 凝聚态物理, 原子分子物理

## 1 激子能级结构

考虑到了包括  $N$  个的环链. 每一个都是由两个相同的细菌叶绿素或叶绿素分子构成, 它可被近似的看作双能级系统. 如果忽略声子以及限制链上的最多只有一个激发的状态, 系统的哈密顿函数可以写作如下的形式:

$$\begin{aligned} H &= \sum_{n\alpha} \Delta_{n\alpha} |n\alpha\rangle\langle n\alpha| + \sum_{n\alpha \neq m\beta} V_{n\alpha, m\beta} |m\beta\rangle\langle n\alpha| \\ &\equiv \sum_{n\alpha} \sum_{m\beta} H_{n\alpha m\beta} |m\beta\rangle\langle n\alpha| \end{aligned} \quad (1)$$

这里  $|n\alpha\rangle$  表示第  $n$  个的  $\alpha$  分子处于激发态而其他的分子处于基态的状态.  $n$  和  $m$  的取值范围是从 1 到  $N$ , 他们表示了环链中的位置,  $\alpha$  和  $\beta$  则用来有区别的表示二聚物中的分子.  $\Delta_{n\alpha}$  表示第  $n\alpha$  个分子 (即第  $n$  个的  $\alpha$  分子) 的激发能量,  $V_{n\alpha, m\beta}$  则用来表示第  $n\alpha$  和第  $m\beta$  个二聚物分子间的相互作用 (转移积分). 在二聚物环链中, 由于它的对称性,  $\Delta_{n\alpha} = \Delta_{\alpha}$ ,  $V_{n\alpha, m\beta} = V_{\alpha\beta}(n-m) = V_{\alpha\beta}(n-m+N)$ .

定义另一个正交归一的基为:

$$\begin{aligned} |\alpha k\rangle &= N^{1/2} \sum_n |n\alpha\rangle \exp(ikn), \\ k &= \frac{2\pi}{N} s, \quad s = 0, \dots, N-1, \end{aligned} \quad (2)$$

这时哈密顿函数就变成了:

$$\begin{aligned} H &= \sum_{k, \alpha, \beta} L_{\alpha\beta}(k) |k\alpha\rangle\langle k\beta|, \\ L_{\alpha\beta}(k) &= \sum_n H_{1\beta, n\alpha} \exp(ikn). \end{aligned} \quad (3)$$

这样问题就可以简化为对  $L_{\alpha\beta}(k)$  进行对角化.  $L_{\alpha\beta}(k)$  的本征方程为:

$$\sum_{\beta} L_{\alpha\beta}(k) u_{\beta\nu}(k) = E_{\nu}(k) u_{\alpha\nu}(k) \quad (4)$$

对于二聚体链, 可以用解析的方法来求解. 本征值为:

$$E_{\nu}(k) = \frac{L_{11} + L_{22}}{2} - (-1)^{\nu} \sqrt{\left(\frac{L_{11} + L_{22}}{2}\right)^2 + |L_{12}(k)|^2} \quad (5)$$

对应的本征函数为:

$$\begin{aligned}
 u_{1v}(k) &= \frac{L_{12}}{\sqrt{|L_{12}|^2 + (E_v - L_{11})^2}}, \\
 u_{2v}(k) &= \frac{E_v - L_{11}}{\sqrt{|L_{12}|^2 + (E_v - L_{11})^2}},
 \end{aligned} \tag{6}$$

在归一化条件下:

$$\sum_{\alpha} |u_{\alpha v}(k)|^2 = 1$$

激子矢量是位激发的线性组合, 它可以写作:

$$|k\mu\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n\alpha} u_{\alpha\mu}^* \exp(ikn) |\rangle \tag{7}$$

若单分子的跃迁偶极矩为  $\mathbf{d}_{n\alpha}$ , 跃迁偶极子的激子能级则是:

$$\mathbf{d}_{k\mu} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n\alpha} u_{\alpha\mu}^* \exp(ikn) \mathbf{d}_{n\alpha} \tag{8}$$

这样对应于激子状态的振子强度可以通过求偶极矩的平方给定, 即:

$$A_{\mu}(k) = \frac{1}{N} \sum_{\alpha\beta} u_{\alpha\mu}^* u_{\beta\mu}^* \sum_{nm} \mathbf{d}_{n\alpha} \mathbf{d}_{m\beta} \exp[ik(n-m)]. \tag{9}$$

方程(3)中  $L(k)$  的矩阵形式为:

$$L(k) = \begin{bmatrix} \sum_{j=1}^N H_{11,j1} \exp(ikj) & \sum_{j=1}^N H_{11,j2} \exp(ikj) \\ \sum_{j=1}^N H_{12,j1} \exp(ikj) & \sum_{j=1}^N H_{12,j2} \exp(ikj) \end{bmatrix} \tag{10}$$

考虑到系统的对称性和周期性边界条件, 它可以用位能量  $\Delta_{\alpha}$  来和转移积分  $V_{\alpha\beta}(n-m)$  来表示. 当  $N$  为奇数:

$$\begin{aligned}
 L(k) &= \begin{bmatrix} \Delta_1 + \sum_{j=1}^{\frac{N-1}{2}} 2V_{11}(j) \cos jk & \sum_{j=1}^N V_{12}(j) \exp(ikj) \\ \sum_{j=1}^N V_{21}(j) \exp(ikj) & \Delta_2 + \sum_{j=1}^{\frac{N-1}{2}} 2V_{22}(j) \cos jk \end{bmatrix} \\
 &= \begin{bmatrix} \Delta_1 + \sum_{j=1}^{\frac{N-1}{2}} 2V_{11}(j) \cos jk & \sum_{j=1}^N V_{12}(j) \exp(ikj) \\ \sum_{j=1}^N V_{12}(j) \exp(-ikj) & \Delta_2 + \sum_{j=1}^{\frac{N-1}{2}} 2V_{22}(j) \cos jk \end{bmatrix}
 \end{aligned} \tag{11}$$

由于  $V_{11}(j) = V_{11}(N-j)$ ,  $V_{22}(j) = V_{22}(N-j)$  以及  $V_{21}(j) = V_{21}(N-j)$ , 可以得到激子的能级:

$$E_v(k) = \Delta_+^{odd} - (-1)^v \sqrt{(\Delta_-^{odd})^2 + \left| \sum_{j=1}^N V_{12}(j) \exp(ikj) \right|^2}, \quad (12)$$

$$\Delta_{\pm}^{odd}(k) = \frac{\Delta_1 \pm \Delta_2}{2} + \sum_{j=1}^{\frac{N-1}{2}} [V_{11}(j) \pm V_{22}(j)] \cos jk$$

当  $N$  为偶数, 则矩阵  $L(k)$  为:

$$L(k) = \begin{bmatrix} \Delta_1 - V_{11}\left(\frac{N}{2}\right) + \sum_{j=1}^{\frac{N-1}{2}} 2V_{11}(j) \cos jk & \sum_{j=1}^N V_{12}(j) \exp(ikj) \\ \sum_{j=1}^N V_{21}(j) \exp(ikj) & \Delta_2 - V_{22}\left(\frac{N}{2}\right) + \sum_{j=1}^{\frac{N-1}{2}} 2V_{22}(j) \cos jk \end{bmatrix} \quad (13)$$

对应的激子能谱则为:

$$E_v(k) = \Delta_+^{even} - (-1)^v \sqrt{(\Delta_-^{even})^2 + \left| \sum_{j=1}^N V_{12}(j) \exp(ikj) \right|^2}, \quad (14)$$

$$\Delta_{\pm}^{even}(k) = \frac{\Delta_1 \pm \Delta_2}{2} + \frac{V_{11}\left(\frac{N}{2}\right) \pm V_{22}\left(\frac{N}{2}\right)}{2} + \sum_{j=1}^{\frac{N-1}{2}} [V_{11}(j) \pm V_{22}(j)] \cos jk$$

根据偶极子与偶极子之间的相互作用的近似, 细菌叶绿素间的转移积分可以表示为:

$$V_{\alpha\beta}(n-m) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0\eta^2} \left[ \frac{\mathbf{d}_{n\alpha} \cdot \mathbf{d}_{m\beta}}{R^3} - \frac{3(\mathbf{d}_{n\alpha} \cdot \mathbf{R}_{n\alpha m\beta})(\mathbf{d}_{m\beta} \cdot \mathbf{R}_{n\alpha m\beta})}{R^5} \right] \quad (15)$$

这里  $\mathbf{d}_{n\alpha}$  和  $\mathbf{d}_{m\beta}$  是对应的细菌叶绿素的跃迁偶极距;  $\mathbf{R}_{n\alpha m\beta}$  则是从第  $n\alpha$  个细菌叶绿素指向第  $m\beta$  个细菌叶绿素的位置矢量,  $R$  是它的模;  $\eta$  则表示周围媒介的折射率. 根据图 1 中的符号:

$$\mathbf{d}_{n\alpha} \cdot \mathbf{d}_{m\beta} = d^2 \left\{ \sin \theta_\alpha \sin \theta_\beta \cos [\gamma(n-m) + \gamma'(\alpha-\beta) + \varphi_\alpha - \varphi_\beta] + \cos \theta_\alpha \cos \theta_\beta \right\}.$$

将上式带入到方程 (15) 中, 则:

$$V_{\alpha\beta}(j) = \frac{d^2}{4\pi\epsilon_0\eta^2 \{2r \sin[\gamma j/2 + \gamma'(\alpha-\beta)]\}^3} \\ \times \left\{ \sin \theta_\alpha \sin \theta_\beta \left[ 3 \cos(\varphi_\alpha + \varphi_\beta) - \cos(\varphi_\beta - \varphi_\alpha + \gamma j + \gamma'(\beta-\alpha)) \right] / 2 \right. \\ \left. + \cos \theta_\alpha \cos \theta_\beta \right\}$$

上式中  $\alpha$  和  $\beta$  表示二聚物中分子的位置,  $\gamma$  和  $\gamma'$  分别表示不同二聚物间相邻的分子间和同一个二聚物的相邻分子间的旋转角,  $d$  则表示分子跃迁偶极距的绝对值.

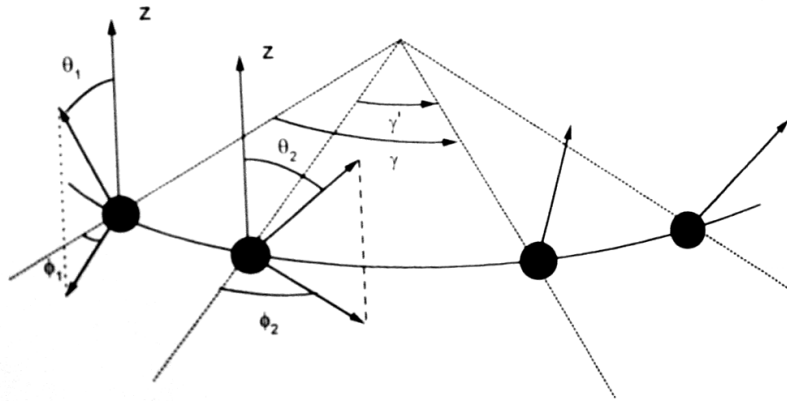


图1 一个二聚体环状链的模型

由于周期性边界条件和系统的对称性,并非所有的激子态都是光学跃迁允许的.在有限振子强度情况下只有跃迁到六个激子态才是允许的<sup>[4]</sup>.对于链的简并态,振子强度为

$$A_v(\pm\gamma) = \frac{1}{2} Nd^2 \sum_{\alpha\beta} u_{\alpha v}(\pm\gamma) u_{\beta v}^*(\pm\gamma) \sin\theta_\alpha \sin\theta_\beta \exp[\pm i(\gamma'(\alpha - \beta) + \varphi_\alpha - \varphi_\beta)] \quad (16)$$

对于非简并态:

$$A_v(0) = Nd^2 \sum_{\alpha\beta} u_{\alpha v}(0) u_{\beta v}^* \cos\theta_\alpha \cos\theta_\beta \quad (17)$$

将方程(6)代入上述方程,我们得到与文献[4]的类似结果:

$$A_v(\gamma) = \frac{Nd^2}{2(F_v(\gamma) + 1)} \{F_v(\gamma)^2 \sin^2\theta_1 + \sin^2\theta_2 + 2F_v(\gamma) \frac{\text{Re}L_{12}(\gamma)}{|L_{12}(\gamma)|} \cos(\varphi_1 - \varphi_2 - \gamma') \sin\theta_1 \sin\theta_2\} \quad (18)$$

以及:

$$A_v(0) = \frac{Nd^2}{F_v(0)^2 + 1} [F_v(0) \cos\theta_1 + \cos\theta_2]^2 \quad (19)$$

这里

$$F_v(k) = \frac{|L_{12}(k)|}{E_v(k) - L_{11}} \quad (20)$$

因为系统中所有色素分子间的相互作用都已包括在内,故 $F_v(k)$ 和 $L_{12}$ 的表达式与文献[4]中的表达式有所不同.

圆二色性谱对复合体的结构是比较敏感的,它的一般表达式为:

$$C_v(k) \sim \frac{1}{N} \sum_{\alpha\beta} u_{\beta v}^*(k) \sum_{nm} e^{ik(m-n)} \mathbf{r}_{n\alpha m\beta} \cdot (\mathbf{d}_{n\alpha} \times \mathbf{d}_{m\beta}) \quad (21)$$

由于二聚体环链的对称性,我们仅仅得到了圆二色性的六个非零分量.非简并的分量为:

$$C_v(0) \sim -\frac{rNd^2}{F_v(0)^2 + 1} \left[ F_v(0)^2 \sin 2\theta_1 \sin \varphi_1 + \sin 2\theta_2 \sin \varphi_2 + F_v(0)H(0) \right], \quad (22)$$

上式中:

$$H(0) = \sin \theta_1 \cos \theta_2 \sin \varphi_1 + \cos \theta_1 \sin \theta_2 \sin \varphi_2.$$

简并对的分量则是:

$$C_v(\gamma) \sim -\frac{rNd^2}{2(F_v(\gamma)^2 + 1)} \left[ F_v(\gamma)^2 \sin 2\theta_1 \sin \varphi_1 + \sin 2\theta_2 \sin \varphi_2 + F_v(\gamma)H(\gamma) \right] \quad (23)$$

上式中:

$$H(\gamma) = \text{Re} \frac{L_{12}(\gamma)}{|L_{12}(\gamma)|} \left[ \sin \theta_1 \cos \theta_2 \exp(\varphi_1 - \gamma' - \frac{\pi}{2}) \right. \\ \left. + \cos \theta_1 \sin \theta_2 \exp(\varphi_2 + \gamma' + \frac{\pi}{2}) \right] \quad (24)$$

$C_v(\gamma)$  的表达式和引文[4]中方程 (22) 中的有所不同.

我们已经知道  $N$  个单体组成的一个集合的激子能带是由  $N$  个激子能级组成, 这就是所谓的 Davydov 分裂. 在最近邻相互作用近似下, 激子能带的宽度为  $4V$ ,  $V$  是相邻单体间的共振积分. 当单体被二聚体替代时, 环的激子谱将会变得更加复杂. 相距最近的二聚体与二聚体间的相互作用已经在文献[4]中讨论过了. 现在的工作就是把它推广到更一般的情况, 也就是所有的发色团分子间的相互作用都被包括进来的情况.

首先考虑  $N$  为奇数的情况. 包括所有 Bchls 间的相互作用, 从方程 (12) 中我们可以看到所有的激子带宽就是

$$W = E_+(0) - E_-(0) \\ = 2 \sqrt{\left[ \Delta_-^{odd}(0) \right]^2 + \left| \sum_{j=1}^N V_{12}(j) \right|^2}, \quad (25)$$

并且, 能带分裂成了两个带宽相同的 Davydov 次能带:

$$W_{\pm}^{odd} = \pm \left[ E_{\pm}(0) - E_{\pm} \left( \frac{N-1}{N} \pi \right) \right] \\ = \sum_{j=1}^{\frac{N-1}{2}} [V_{11}(j) \pm V_{22}(j)] \left( 1 \mp \cos j \frac{N-1}{N} \pi \right) \\ + \sqrt{\left[ \Delta_-^{odd}(0) \right]^2 + \left| \sum_{j=1}^N V_{12}(j) \right|^2} \\ - \sqrt{\left[ \Delta_-^{odd} \left( \frac{N-1}{N} \pi \right) \right]^2 + \left| \sum_{j=1}^N V_{12}(j) \exp \left( i \frac{N-1}{N} j \pi \right) \right|^2} \quad (26)$$

上式中下表+表示上子带, -表示下子带. 两个子带间的能隙宽度为:

$$G^{odd} = 2 \sqrt{\left[ \Delta_-^{odd} \left( \frac{N-1}{N} \pi \right) \right]^2 + \left| \sum_{j=1}^N V_{12}(j) \exp \left( i \frac{N-1}{N} j \pi \right) \right|^2} \quad (27)$$

当  $N$  为偶数时, 激子能带的结构就变得简单一些. 总的能带宽度和方程 (25) 是一样的, 但子带的宽度变为:

$$\begin{aligned} W_{\pm}^{even} &= \pm[E_{\pm}(0) - E_{\pm}(\pi)] \\ &= \sum_{j=1}^{\frac{N}{2}} [V_{11}(j) \pm V_{22}(j)] (1 \mp (-1)^j) \\ &\quad + \sqrt{[\Delta_{-}^{even}(0)]^2 + \left| \sum_{j=1}^N V_{12}(j) \right|^2} \\ &\quad - \sqrt{[\Delta_{-}^{even}(\pi)]^2 + \left| \sum_{j=1}^N (-1)^j V_{12}(j) \right|^2} \end{aligned} \quad (28)$$

所以上、下子带间的能隙宽度为:

$$G^{even} = 2 \sqrt{[\Delta_{-}^{even}(\pi)]^2 + \left| \sum_{j=1}^N (-1)^j V_{12}(j) \right|^2} \quad (29)$$

如果二聚体中两个分子时相同的, 也就是  $\Delta_1 = \Delta_2 = \Delta$ , 则:

$$\begin{aligned} \Delta_{+}^{odd} &= \Delta + \sum_{j=1}^{\frac{N-1}{2}} [V_{11}(j) + V_{22}(j)] \cos jk, \\ \Delta_{-}^{odd} &= \sum_{j=1}^{\frac{N-1}{2}} [V_{11}(j) - V_{22}(j)] \cos jk \end{aligned} \quad (30)$$

及:

$$\begin{aligned} \Delta_{+}^{even} &= \Delta + \frac{1}{2} [V_{11}(\frac{N}{2}) + V_{22}(\frac{N}{2})] + \sum_{j=1}^{\frac{N-1}{2}} [V_{11}(j) + V_{22}(j)] \cos jk, \\ \Delta_{-}^{even} &= \frac{1}{2} [V_{11}(\frac{N}{2}) - V_{22}(\frac{N}{2})] + \sum_{j=1}^{\frac{N-1}{2}} [V_{11}(j) - V_{22}(j)] \cos jk. \end{aligned} \quad (31)$$

把它们代入到 (12), (14), (27) 以及 (29) 式中, 就可以立刻得到修正的激子能级, 能带宽度以及能隙宽度了.

如果我们只考虑最近邻作用近似, 问题就可以大大简化了. 令  $V_b = V_{11}(0)$  和  $V_a = V_{12}(1)$  分别为同一个二聚体中两个相邻分子和毗邻的两个二聚体中的相邻分子的相互作用能, 则:

$$E_v(k) = \frac{\Delta_1 + \Delta_2}{2} - (-1)^v \sqrt{\left( \frac{\Delta_1 - \Delta_2}{2} \right)^2 + |L_{12}(k)|^2}, \quad (32)$$

式中,

$$L_{12}(k) = V_a e^{-ikj} + V_b. \quad (33)$$

结果刚好和文献[4]中的(8)及(9)式相同. 所以我们的解析方法是对 Liulia 等人所得结果的合理拓展.

必须要强调的是最低的激子能级和最强的容许的跃迁能级  $E_1$  (借用自文献[3]) 间的能量差, 因为最近的烧孔实验得出了最低能级. 由式(12)和(14), 当  $N$  为奇数时

$$\Delta E_1^{odd} = \sqrt{\left[\Delta_{-}^{odd}(0)\right]^2 + \left|\sum_{j=1}^N V_{12}(j)\right|^2} - \sqrt{\left[\Delta_{-}^{odd}(\gamma)\right]^2 + \left|\sum_{j=1}^N V_{12}(j) \cos j \frac{2\pi}{N}\right|^2} - \sum_{j=1}^{\frac{N-1}{2}} [V_{11}(j) + V_{22}(j)] \left[1 - \cos j \frac{2\pi}{N}\right], \quad (34)$$

当  $N$  为偶数时

$$\Delta E_1^{even} = \sqrt{\left[\Delta_{-}^{even}(0)\right]^2 + \left|\sum_{j=1}^N V_{12}(j)\right|^2} - \sqrt{\left[\Delta_{-}^{even}(\gamma)\right]^2 + \left|\sum_{j=1}^N V_{12}(j) \cos j \frac{2\pi}{N}\right|^2} - \sum_{j=1}^{\frac{N-1}{2}} [V_{11}(j) + V_{22}(j)] \left[1 - \cos j \frac{2\pi}{N}\right]. \quad (35)$$

## 2 讨论

在本文中我们采用了解析方法来研究二聚体的紧密结合的环状链的激子能级结构. 在这个体系中使用点激子近似, 考虑了所有的色素分子间的相互作用. 利用偶极子间的相互作用能量和指向参数, 我们解析地给出了激子能级、带宽和两个 Davydov 子能带间的带宽. 对紫色光合细菌 LH1 和 LH2 体系得应用, 将随后另文讨论.

### 参考文献

- [1] Van Grondelle R, Dekker J.P, Gillbro T, et al. Energy transfer and trapping in photosynthesis [J]. *Biochim Biophys Acta*, 1994, 1187: 1-65.
- [2] Sauer K, Cogdell R J, Prince S M, et al. Structure-based calculations of the optical spectra of the LH 2 bacteriochlorophyll-protein complex from *Rhodospseudomonas acidophila* [J]. *Photochem Photobiol*, 1996, 64: 564-576.
- [3] Wu H M, Reddy N R S, Small G J. Exciton level structure and energy disorder of the B850 ring of the LH2 antenna complex [J]. *J Phys Chem B*, 1997, 101: 651-656.
- [4] Liulia V, Valkunas L, Van Grondel R. Excitons in Chains of Dimers [J]. *J Phys Chem B*, 1997, 101: 7343-7363.
- [5] Wu H M, Ratsep M, Lee I J, et al. Exciton level structure and energy disorder of the B850 ring of the LH2 antenna complex [J]. *J Phys Chem B* 1997, 101: 7654-7665.
- [6] HU X, Ritz T, Damjanović A, et al. Pigment Organization and Transfer of Electronic Excitation in the Photosynthetic Unit of Purple Bacteria [J]. *J. Phys Chem B*, 1997, 101: 3854-3855.



# Excitonic Level Structure of LH1 and LH2 of Purple Photosynthetic Bacteria (I) —— Theory and Model

YANG Guangcan

(School of Physics and Electronic Information, Wenzhou University, Wenzhou, China 325035)

**Abstract:** The excitonic level structure of a ringlike chain of dimers is discussed analytically to understand the possible spectral properties of LH1 and LH2 of purple photosynthetic bacteria. Under the approximation of dipole-dipole interaction between Bchls, the excitonic levels, band width and energy gap between two Davydov subband are expressed analytically in terms of all interaction energies and oriental parameters of dipole. Our model include all interactions between pigment molecules in the system.

**Key words:** Photosynthesis; Light harvest antenna; Exciton; Energy level structure

(编辑: 赵肖为)