**Моделирование неадиабатических процессов фотоионизации
анионного хромофора зеленого флуоресцентного белка**

***Белецан О.Б.***

*Студент, 5 курс специалитета*

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,*

*химический факультет, Москва, Россия*

*E-mail: ol.beletsan2015@yandex.ru*

Зеленый флуоресцентный белок (GFP), впервые обнаруженный у медузы *Aequorea Victoria*, имеет большое значение для практической биологии, в частности, для непрерывного мониторинга экспрессии генов и изменений в живых клетках. При изучении спектральных и фотоэлектронных свойств изолированного анионного хромофора белка GFP особое внимание уделяется низколежащим электронно-возбужденным состояниям в видимой области электромагнитного спектра, перенос электрона из которых обусловлен электронно-колебательным взаимодействием. Такие процессы приводят к появлению низкоэнергетических электронов в фотоэлектронных спектрах. Целью данной работы является развитие теоретических подходов для изучения механизмов образования низкоэнергетических электронов из слабосвязанных состояний анионов биологических хромофоров.

В работе разработан и реализован метод расчета фотоэлектронных спектров и спектров колебательной автоионизации из слабосвязанных электронно-возбужденных состояний молекулярных анионов. Метод основан на расчете матричных элементов неадиабатического взаимодействия в пространстве как электронных, так и ядерных переменных с учетом эффекта Душинского. При расчетах также учитывалась неравновесная заселенность колебательных уровней в электронно-возбужденном состоянии молекулярного аниона при возбуждении из основного электронного состояния лазерными импульсами с различной энергией. Матричные элементы вектора неадиабатической связи между электронно-возбужденным и ионизированным состоянием молекулярного аниона в пространстве электронных переменных рассчитывались с помощью многоконфигурационного метода самосогласованного поля в полном активном пространстве CASSCF(4,6)/(aug)-cc-pVTZ+. Вычисления энергий и градиентов в различных электронных состояниях аниона проведены с использованием инвариантной многоконфигурационной квазивырожденной теории возмущений второго порядка в варианте XMCQDPT2/CASSCF(14,14)/(aug)-cc-pVTZ+, колебательный анализ в первом возбужденном электронном состоянии аниона S1 проведен в варианте XMCQDPT2/CASSCF(14,13)/(aug)-cc-pVTZ.

Установлено, что первое электронно-возбужденное состояние S1 изолированного анионного хромофора зеленого флуоресцентного белка является слабосвязанным. С помощью разработанного метода проведено моделирование спектров фотоионизации и фотоэлектронных спектров анионного хромофора белка GFP при колебательной автоэмиссии электронов из состояния S1. Полученные результаты позволяют идентифицировать неадиабатический канал фотоионизации в экспериментальных спектрах и объяснить природу специфичности в механизме образования низкоэнергетических электронов.

*Автор благодарен научному руководителю к.ф.-м.н. Боченковой А.В. Работа* *выполнена с использованием оборудования Центра коллективного пользования сверхвысокопроизводительными вычислительными ресурсами МГУ имени М.В. Ломоносова, а также вычислительного кластера, закупленного по программе развития МГУ имени М.В. Ломоносова. Работа поддержана грантом РНФ №22-13-00126.*