

The background of the cover features several scientific graphs. In the upper left, a graph shows five curves labeled 1 through 5, with a vertical axis from 0.2 to 1.0 and a horizontal axis labeled 'J'. In the upper right, a graph shows a single curve labeled 'P' with a horizontal axis labeled 'I'. In the lower right, a graph shows five curves labeled 1 through 5, with a horizontal axis on a logarithmic scale from 10⁻³ to 10¹.

Г. Ю. Ризниченко
А. Б. Рубин

Динамические модели электронного транспорта в фотосинтезе



Г. Ю. Ризниченко, А. Б. Рубин

**ДИНАМИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ
ЭЛЕКТРОННОГО ТРАНСПОРТА
В ФОТОСИНТЕЗЕ**



Москва ♦ Ижевск

2020

УДК 577.3
ББК 28.071
Р498



Издание осуществлено при финансовой поддержке
Российского фонда фундаментальных исследований
по проекту № 20-14-00017, не подлежит продаже

Ризниченко Г. Ю., Рубин А. Б.

Динамические модели электронного транспорта в фотосинтезе. —
М.–Ижевск : Институт компьютерных исследований, 2020. — 332 с.

ISBN 978-5-4344-0866-0

В книге рассматриваются современные математические модели электронного транспорта и сопряженных процессов в фотосинтезе: кинетические, многочастичные, броуновские. Анализ моделей раскрывает роль диффузии, электростатических взаимодействий белков, геометрии реакционного объема и ионной силы среды в регуляции первичных процессов фотосинтеза. Результаты моделирования в сопоставлении с экспериментальными данными раскрывают механизмы переключения электронных потоков в клетках растений и водорослей в различных условиях, что используется в биотехнологии и экологическом мониторинге.

Книга предназначена для научных работников, аспирантов и магистров, ведущих фундаментальные исследования в области фотосинтеза и прикладные исследования в области фотобиотехнологии и экологического мониторинга. В книгу вошли результаты исследований последних двух десятилетий, выполненные при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований.

© Г. Ю. Ризниченко, А. Б. Рубин, 2020

© АНО «Ижевский институт
компьютерных исследований», 2020

ISBN 978-5-4344-0866-0

ОГЛАВЛЕНИЕ

ПРЕДИСЛОВИЕ	9
ВВЕДЕНИЕ	11
В1. Модели биологических процессов. Системно-динамические и агентные модели.....	11
В2. История исследования фотосинтеза.....	16
В3. Фотосинтетическая мембрана и протекающие в ней процессы.....	20
I. КИНЕТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ ФОТОСИНТЕТИЧЕСКОГО ЭЛЕКТРОННОГО ТРАНСПОРТА	29
I.1. Базовые модели	30
1.1. Перенос электронов в мультиферментном комплексе. Уравнения для вероятностей состояний комплекса.....	30
1.2. Перенос электрона в комплексе двух переносчиков.....	31
1.3. Перенос электрона в комплексе <i>n</i> переносчиков.....	33
1.4. Взаимодействие мультиферментных комплексов с подвижными переносчиками.....	35
1.5. Перенос электрона в изолированном фотореакционном центре...38	
1.6. Типы регуляции фотосинтетических процессов.....	39
1.7. Базовая модель взаимодействия двух фотосистем.....	41
Уравнения для вероятностей состояний фотосистемы II.....	43
Схема состояний ФС II.....	44
Процесс разделения зарядов.....	44
Передача электрона из донорной части в РЦ ФС II.....	45
Передача электрона от ФС II в пул хинонов.....	46
Уравнения для вероятностей состояний фотосистемы I.....	47
Передача электрона из донорной части в РЦ ФС I.....	48
1.8. Уравнения, описывающие изменение степени восстановленности подвижных переносчиков.....	50
I.2. Моделирование электронного транспорта и сопряженных процессов в фотосистеме II	52
2.1. Кинетика флуоресценции хлорофилла.....	52

Переменная и постоянная флуоресценция	53
Кривая индукции флуоресценции хлорофилла.....	55
Происхождение переменной флуоресценции хлорофилла <i>a</i>	57
2.2. Модель переноса электрона в комплексе фотосистемы II.....	58
Схема состояний комплекса фотосистемы II	60
Приток электронов от водоразлагающего комплекса	63
Процессы диссипации энергии	66
Учет электрического и электрохимического потенциала на мембране.....	66
Описание кинетики формирования $\Delta\Psi$ (<i>t</i>), рН люмена и стромы	67
2.3. Моделирование кинетики выхода флуоресценции после освещения насыщающим наносекундным лазерным импульсом.	68
Оценка констант скоростей процессов безызлучательной диссипации энергии в реакционном центре ФС II при разных интенсивностях света.....	72
2.4. Моделирование нарастающего участка индукции флуоресценции в ответ на включение постоянного света.....	74
1.3. Детальная модель процессов в фотосинтетической мембране.....	78
Общая схема процессов	78
3.1. Цитохромный комплекс.....	80
Q-цикл Митчелла.....	80
Модель. Схема состояний.....	83
Вероятности состояний комплекса.....	85
Концентрации подвижных переносчиков.....	87
Концентрация протонов в люмене	87
3.2. Комплекс фотосистемы I	91
Природа медленной стадии восстановления P700.....	92
3.3. Транспорт электрона подвижными переносчиками	96
3.4. Трансмембранный электрохимический потенциал, перенос ионов через мембрану и буферные свойства мембраны	97
3.5. Оценка параметров кинетической модели. Проблемы идентификации	98
3.6. Фитирование параметров модели по экспериментальным кривым индукции флуоресценции и кинетике редокс- превращений P700	100
Кинетика изменения во времени электрического и электрохимического потенциала	104
Динамика состояний ФС II.....	105

PQ-пул, $\text{Cyt } b_6/f$ и компоненты ФС I.....	106
Линейный и циклический потоки электронов	108
I.4. Анализ больших массивов данных. Упрощенные модели	112
4.1. Аппроксимация нарастающего участка кривой флуоресценции экспоненциальными функциями	112
4.2. Мультиэкспоненциальная аппроксимация. Спектральный анализ.....	114
4.3. Мониторинг фотосинтетической активности культуры микро- дорослей при истощении азота в среде	119
Изменение спектральных характеристик и параметров индукци- онной кривой флуоресценции в процессе роста культуры.....	121
Теплокарты динамики изменения компонентного состава кривых ОКЛР.....	122
4.4. Связь упрощенных и детальных моделей.....	126
Редукция детальной схемы.....	128
Верификация модели	130
I.5. Переключение режимов функционирования фотосинтетической цепи в условиях минерального голодания.....	134
5.1. Изменения электрон-транспортной системы в условиях стресса. Роль хлородыхания	134
5.2. Модель переключения электронных потоков	137
Иерархия времен в системе	140
Миллисекундный временной диапазон. Перенос электронов в ФС II.....	143
Секундный временной диапазон. Изменение концентрации протонов в строме вблизи ФС II.....	144
Ответ системы на изменение параметров.....	146
5.3. Процессы, протекающие в часовом временном диапазоне. Восстановленность пула пластохинонов. Роль хлородыхания ...	147
Нелинейный механизм кинетической регуляции	148
I.6. Прямой кинетический метод Монте-Карло. Описание процессов в ансамблях фотосинтетических реакционных центров.....	152
6.1. Организация модели.....	154
Структура модели.....	154
Параметры модели	157
Алгоритм моделирования.....	160

6.2. Энергетическая связь между реакционными центрами в димере ФС II	163
Альфа- и бета-центры	164
6.3. Верификация модели по экспериментальным данным	166
Влияние интенсивности света на форму кривой индукции флуоресценции.....	168
Моделирование действия ингибиторов	170
6.4. Возможности кинетического метода Монте-Карло.....	175
II. МНОГОЧАСТИЧНОЕ КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ	178
Диффузионно-контролируемые реакции	179
II.1. Принципы построения многочастичной броуновской модели	182
1.1. Формирование сцены и расположение объектов	183
1.2. Моделирование броуновского движения. Уравнение Ланжевена	186
Решение уравнения Ланжевена.....	187
1.3. Модель взаимодействия фотосинтетических белков без учета электрических сил	188
1.4. Учет столкновений и взаимодействие с белковыми комплексами. Радиус и вероятность взаимодействия	190
1.5. Метод броуновской динамики (BD) и прямые многочастичные модели.....	193
1.6. Сопряжение математических способов описания различных процессов в тилакоидной мембране в компьютерной модели	194
Моделирование переноса электрона с мобильного переносчика на белковый комплекс и переноса внутри комплексов.....	197
Моделирование протонного транспорта.....	198
Модель выделения протонов в люмен	199
Модель латеральной диффузии протонов	201
Моделирование утечки протонов через АТФ-синтазу и синтеза АТФ	203
Программная реализация.....	204
II.2. Моделирование белок-белковых взаимодействий в растворе	206
2.1. Стадии белок-белковых взаимодействий	206
2.2. Описание диффузии белков. Аппроксимация эллипсоидами вращения.....	209

2.3. Моделирование столкновений белков. Описание формы белков в виде набора сфер	212
2.4. Моделирование электростатических взаимодействий	212
Расчет электростатической силы в моделях броуновской динамики	214
Эквипотенциальные поверхности белков	215
2.5. Оценка константы скорости взаимодействия белков на основе сравнения результатов компьютерных и реальных экспериментов в растворе	219
II.3. Роль электростатических взаимодействий в процессах взаимодействия белков — переносчиков электрона при фотосинтезе	223
3.1. Влияние поверхностных зарядов на скорость взаимодействия белков	223
3.2. Зависимость константы скорости образования комплекса от ионной силы раствора для дикого типа и мутантных форм ...	226
3.3. Диффузионный захват. Продуктивные и непродуктивные диффузионно-столкновительные комплексы	231
3.4. Роль электростатических взаимодействий в процессе диффузионного сближения и докинга электрон-транспортных белков	234
3.5. Сравнительный анализ взаимодействия Pс с Cyt <i>f</i> и реакционными центрами ФС I высших растений и цианобактерий. Роль электростатических взаимодействий	237
II.4. Броуновское/молекулярное моделирование образования комплекса электрон-транспортных белков	243
4.1. Молекулярное моделирование формирования комплекса Pс–Cyt <i>f</i> растений, зеленых микроводорослей и циановых бактерий	243
4.2. Сравнительный анализ роли электростатических взаимодействий у растений и циановых бактерий	244
II.5. Многочастичная броуновская модель переключения электронных потоков в акцепторной части ФС I с пути фиксации CO₂ на путь выделения водорода	249
5.1. Особенности фотосинтеза в водородвыделяющих микроводорослях	249

5.2. Модельные зависимости констант скоростей процессов образования комплексов ферредоксина с ФНР и гидрогеназой от рН среды	251
5.3. Электростатические свойства взаимодействующих молекул при разных рН.....	254
П.6. Процессы взаимодействия белков в люмене тилакоида.....	261
6.1. Описание трехмерного реакционного объема — модельной сцены тилакоида	263
6.2. Влияние электростатического поля фотосинтетической мембраны на реакцию взаимодействия пластоцианина с цитохромом <i>f</i> в люмене тилакоида	267
6.3. Компьютерное моделирование переноса электрона по цепи фотосинтетического транспорта подвижным белком — переносчиком Рс в люмене тилакоида	272
ОБСУЖДЕНИЕ. ПЕРСПЕКТИВЫ	282
ЗАКЛЮЧЕНИЕ	288
ЛИТЕРАТУРА.....	291