

МЕЗОМАСШТАБНЫЕ ПОДХОДЫ К МОДЕЛИРОВАНИЮ ФОТОСИНТЕТИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

Хрущев С.С., Плюснина Т.Ю., Ризниченко Г.Ю., Рубин А.Б.

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия

Сложная структурная организация фотосинтетического аппарата растений необходима для успешного протекания процессов запасаения энергии света в форме химических связей. Основанное на данных об атомной структуре трансмембранных комплексов и мобильных переносчиков электрона математическое моделирование позволило выявить многие из ключевых механизмов первичных фотобиологических процессов. Эти процессы происходят в пределах молекулярных комплексов размером порядка десятков нанометров и имеют характерные времена в диапазоне от фемто- до наносекунд. Полученные результаты дали возможность понять, почему трансформация энергии не может происходить в гомогенной среде, но требует локализации окислительно-восстановительных реакций в крупных трансмембранных белковых комплексах. Кинетические и стохастические модели фотосинтетических процессов позволяют выявить отдельные их стадии, наиболее чувствительные к действию физических и химических факторов, и являются основой для применения биофизических подходов в экологическом мониторинге и био- и агротехнологиях. Между этими двумя подходами к математическому моделированию существует качественный разрыв, который существенно ограничивает нашу возможность понимания роли среднемасштабных (размером порядка микрометров) структур, в частности, гранальной организации тилакоидных мембран. Это же ограничение относится и к временному масштабу событий: в настоящее время нет детального понимания механизмов процессов, имеющих характерные времена от миллисекунд до секунд и минут. Целью данной работы является разработка подходов, позволяющих объединить молекулярные и кинетические методы для моделирования мезомасштабной динамики фотосинтетических процессов. В качестве иллюстрации одного из таких подходов рассматривается основанная на методе клеточных автоматов модель фрагмента хлоропласта, включающего грану и сопряженные с ней стромальные тилакоидные ламеллы. В качестве основы для модели разработана аналитическая геометрия граны и окружающих ее стромальных ламелл, воспроизводящая наблюдаемую в эксперименте ультраструктуру и позволяющая варьировать форму компартментов изменением числовых параметров. Пространство внутри хлоропласта разбивается на ромбододекаэдрические ячейки объемом 2 нм^3 , каждой ячейке присваивается идентификатор компартмента: строма, люмен либо тилакоидная мембрана, и производится расстановка неподвижных трансмембранных белковых комплексов, которые занимают часть ячеек, и мобильных переносчиков электрона. Белковые молекулы занимают несколько соседних ячеек, их форма задается по данным рентгеноструктурного анализа или криоэлектронной микроскопии. Модель является дискретной по времени, на каждом шаге моделирования рассчитываются вероятности перемещения молекул подвижных переносчиков электрона в пространстве, переноса электрона между подвижными переносчиками и трансмембранными комплексами и переноса электрона между редокс-центрами, входящими в состав трансмембранных комплексов. Предложенный подход позволил создать модель граны тилакоида, состоящей из нескольких тысяч трансмембранных белковых комплексов и подвижных белков – переносчиков электрона.

Исследование выполнено в рамках научного проекта государственного задания МГУ №121032500060-0 при частичной поддержке грантов РФФИ № 20-04-00465 и РНФ № 22-11-00009.