

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЕРЕХОДНЫХ ПРОЦЕССОВ В ЦИТОХРОМНОМ b_6f -КОМПЛЕКСЕ

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

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

Цитохромный b_6f -комплекс является важным компонентом фотосинтетической электрон-транспортной цепи и выступает в качестве центрального «хаба», через который проходит как линейный поток электронов между фотосистемами 2 и 1, так и циклический поток вокруг фотосистемы 1. Комплекс состоит из четырех цитохромов и железосерного центра Риске, обладающих окислительно-восстановительной активностью. В процессе переноса электрона на пластоцианин происходит существенное изменение конформации комплекса, обеспечивающее сближение центра Риске с цитохромом f . Используя современные данные о строении цитохромного b_6f -комплекса [1] и редокс-потенциалах участников электронного транспорта [2], мы разработали его детальную математическую модель, позволяющую оценить скорость электронного транспорта через комплекс в зависимости от восстановленности пулов мобильных переносчиков электрона пластохинона, пластоцианина и ферредоксина, а также исследовать кинетику переходных процессов в комплексе при изменении степени восстановленности этих пулов. В модели рассматриваются переходы между 9216 состояниями мономера цитохромного b_6f -комплекса, различающимися по редокс-состоянию входящих в его состав реакционных центров и связанных с ним мобильных переносчиков электрона. Модель представляет собой систему обыкновенных дифференциальных уравнений, переменными в которых являются вероятности нахождения комплекса в каждом из состояний. основное кинетическое уравнение является линейным, что позволяет использовать методы линейной алгебры как для нахождения стационарных состояний, так и для расчета кинетики переходных процессов. Разработано программное обеспечение на языке программирования Python, позволяющее автоматически генерировать основное кинетическое уравнение на основе схемы реакций в комплексе, находить стационарные скорости электронных потоков через комплекс в зависимости от констант скорости элементарных реакций и степени восстановленности пулов мобильных переносчиков электрона, а также кинетику изменения электронного потока в ходе переходного процесса, вызванного изменением степени восстановленности одного из пулов. На шестиядерном процессоре i5-8600K, работающем на частоте 3.6 ГГц, поиск стационарного решения для одного набора параметров занимает примерно 4 с, что позволяет провести исследование режимов функционирования комплекса в широком диапазоне изменения параметров. Результаты моделирования находятся в хорошем согласовании с экспериментальными данными. Предполагается использовать полученную модель цитохромного b_6f -комплекса в качестве компонента интегральной модели фотосинтетического электронного транспорта.

Библиографические ссылки

1. High-resolution cryo-EM structures of plant cytochrome b_6f at work / M. Sarewicz [et al.] // Science Advances. 2023. Vol. 9, iss. 2. P. eadd9688.
2. Unexpected heme redox potential values implicate an uphill step in cytochrome b_6f / M. Szwalec [et al.] // The Journal of Physical Chemistry B. 2022. Vol. 126, iss. 47. P. 9771–9780.