

Модель протонного транспорта и синтеза АТФ является частью прямой модели фотосинтетической мембраны. Рассматривая процесс протонного транспорта в фотосинтетической системе, мы учитываем процессы, приводящие к изменению активности во внутритилакоидном пространстве. К ним относятся выделение протонов в люмен, латеральная диффузия и утечка протонов.

Модель выделения протонов в люмен

Выделение протонов происходит в результате индуцированного светом разложения воды в фотосистеме 2, а также за счет окисления пластохинола цитохромным b_6 комплексом. В рамках имитационного подхода мы описываем эти процессы следующим образом. В зависимости от интенсивности света существует вероятность того, что какой-либо комплекс фотосистемы 2 поглотит квант света на данном временном шаге имитационной модели. Рассчитать эту вероятность можно по формуле:

$$p = \frac{I \cdot \sigma \cdot t}{h\nu},$$

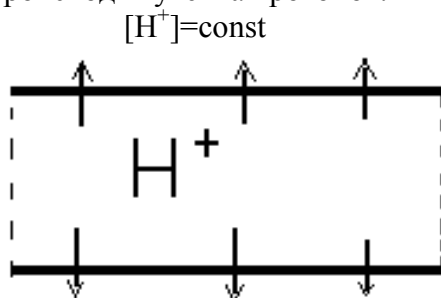
где I – интенсивность света, σ – эффективное сечение поглощения, t – временной шаг модели, h – постоянная Планка, ν – частота поглощаемого света. Если на данном временном шаге модели случайное число, выбранное из равномерного на $[0;1]$ распределения, оказалось меньше p , то фотосистема 2 поглощает квант света, и происходит выделение двух протонов в ячейку сетки, соседнюю с положением данной фотосистемы 2. При этом концентрация свободных протонов в данной ячейке изменится на величину

$$\Delta H_{in}^+ = \frac{2}{dV \cdot (1 + K \cdot B)}.$$

Здесь dV – объем ячейки, K – константа равновесия для реакции связывания протонов с буферными группами, B – концентрация буферных групп. В этой формуле учтено взаимодействие ионов водорода с буферными группами, фиксированными на внутренней и внешней поверхностях тилакоидной мембраны. Физически буферные группы представляют собой выступающие в люмен заряженные аминокислотные остатки в белковых цепях многочисленных комплексов, встроенных в мембрану. Протоны могут временно связываться с этими остатками, что существенно замедляет их диффузию в люмене и примерно в 1000 раз уменьшает концентрацию свободных протонов в водной фазе люмена. В связи с этим, необходимо учитывать наличие буферных групп при моделировании диффузии протонов.

Модель латеральной диффузии протонов.

Моделируется диффузия в люмене (межмембранном пространстве). Геометрически рассматриваемая область представляет собой прямоугольный параллелепипед, где верхняя и нижняя его стороны отображают плоскости фотосинтетической мембраны, через которую происходит утечка протонов.



В рассматриваемой нами системе ионы водорода могут диффундировать в водной фазе внутритилакоидного объема. Значение pH в строме (pH_s) принимается постоянным. В случае хлоропластов условие $pH_s = \text{const}$ выполняется за счет большой буферной емкости внешней среды и самих хлоропластов.

Для моделирования процесса латерального переноса протонов во внутритилакоидном пространстве, используется дифференциальное уравнение, приведенное в работах [1-2].

Уравнение решается методом конечных разностей.

Моделирование утечки протонов через АТФ-синтазу и синтеза АТФ.

Каждый комплекс АТФ-синтазы моделируется как отдельный объект в трехмерном пространстве, расположенный на мембране тилакоида. Поскольку прямая модель переноса электрона дискретна, и утечки протонов также происходят дискретно, по одному протону, необходимо найти способ перехода от описания протонов через концентрацию как функцию, заданную на сетке, к дискретному представлению в виде отдельных протонов. Для этого мы использовали квантовомеханическую аналогию, понимая концентрацию для отдельных протонов как плотность вероятности. В таком рассмотрении мы на каждом шаге имитационной модели имеем дело с вероятностью обнаружить какой-либо протон в ячейке, соседней с выбранной АТФ-синтазой. Если на данном шаге выпадает случайное число, меньшее этой вероятности, мы полагаем, что протон в данной ячейке присутствует, и с некоторой вероятностью p (которая является параметром модели), может произойти утечка протона через данную АТФ-синтазу. При этом происходит поворот подвижной субъединицы α («ротора») на 120 градусов вокруг неподвижной субъединицы γ («статора»). Если через АТФ-синтазу последовательно проходят три протона, происходит синтез одной молекулы АТФ. На данном этапе мы не учитывали, сколько в системе АДФ и свободного фосфата, предполагая, что синтез АТФ лимитируется наличием протонного градиента. Учет остальных факторов планируется при дальнейшем развитии модели.

Литература

1. Дубинский А.Ю., Тихонов А.Н. (1997) Биофизика, 42,644–660.
2. Вершубский А.В., Приклонский В.И., Тихонов А.Н.(2001) Биофизика, 46, 471–481.