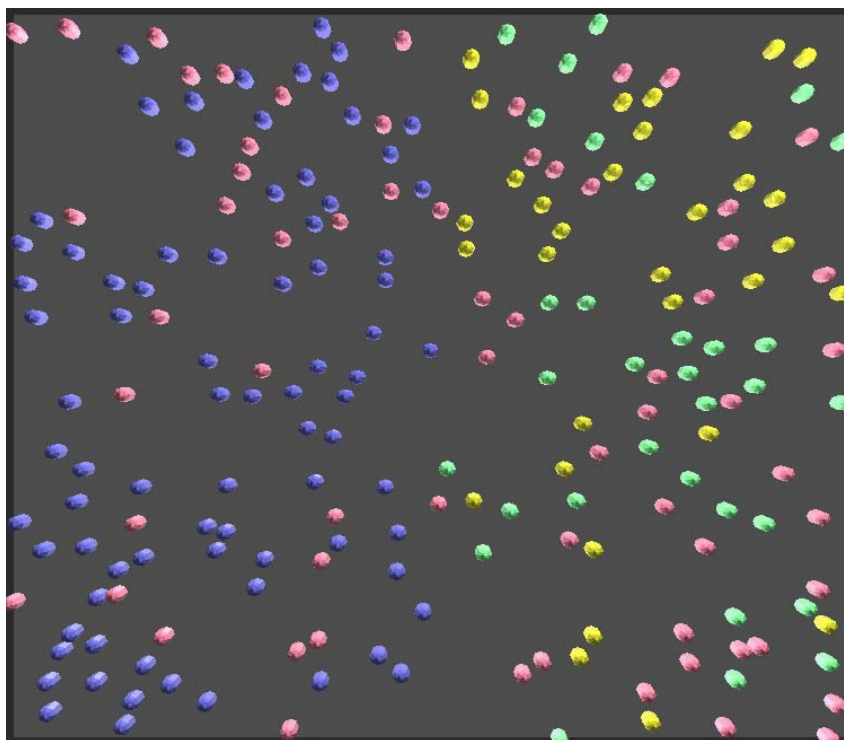


Моделируется отдельная грана тилакоида с прилегающим стромальным участком. Вид сверху на моделируемую область показан на рисунке 1. В гранальной части (слева) распределены фотосистемы II (синие), в стромальной части (справа) – фотосистемы I (зеленые). Цитохромные  $b_6f$  комплексы (розовые) распределены равномерно по стромальной и гранальной частям. Размер области – 200 на 200 нм, что соответствует половине нормальной граны. Комплексы АТФ-синтазы (желтые) расположены в стромальной части (справа). В численном эксперименте моделировалось освещение сцены светом различной интенсивности. При включении света запускается работа цепи переноса заряда, и фотосистема 2 начинает передавать электроны на пластохинон, и выделять протоны в люмен. С пластохинона электроны поступают на цитохромные комплексы, при работе которых в люмен тоже выделяются протоны. Накапливающиеся в люмене протоны начинают диффундировать в сторону стромальной области, и в конце концов в ней создается достаточная концентрация для начала синтеза АТФ. Через некоторое время приток протонов через фотосистему 2 сравнивается с их оттоком через АТФ-синтазы, и скорость синтеза АТФ выходит на постоянный уровень, определяемый интенсивностью света.

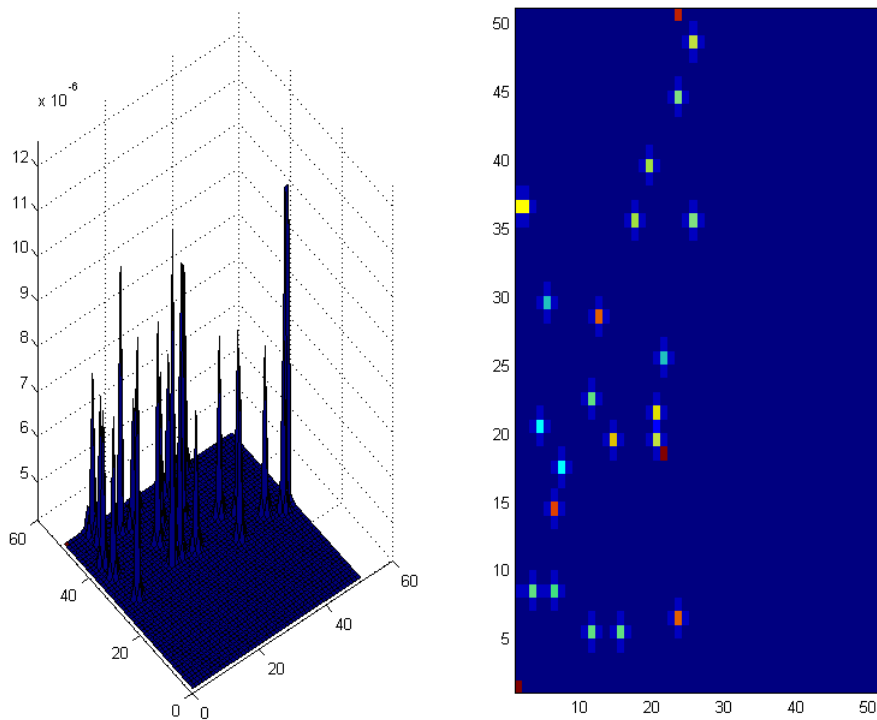


**Рис. 1. Моделируемая область и расположение комплексов на ней.**

- В начальный момент времени все компоненты системы окислены (электронов в системе нет)
- Моделируется постоянное освещение различной интенсивности

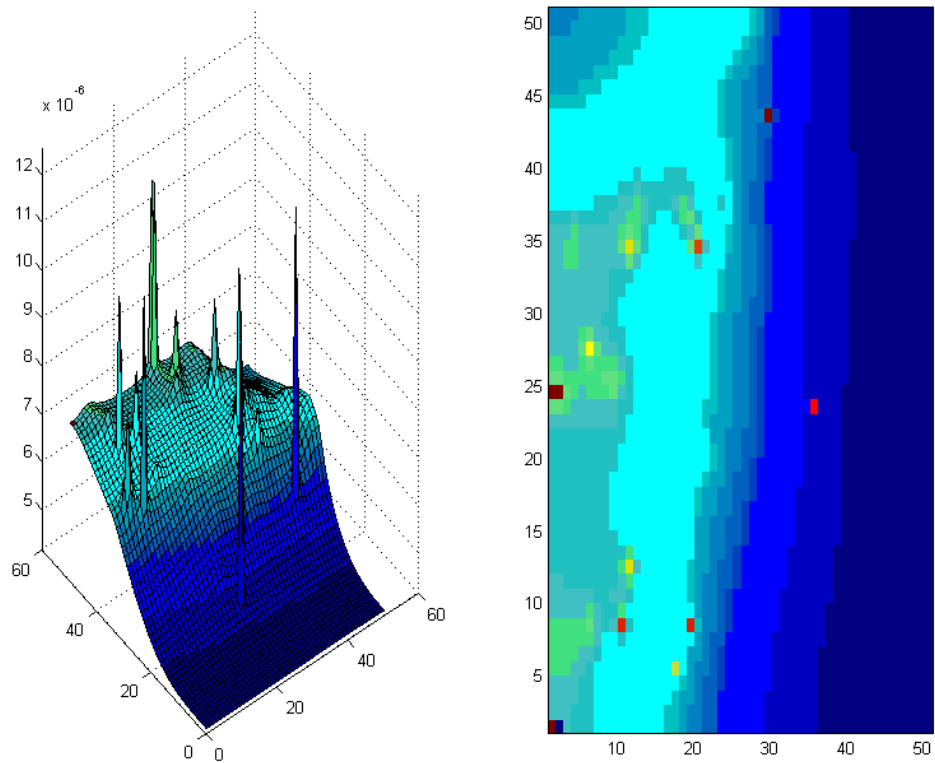
- Фотосистема II служит источником электронов и протонов
- Цитохромный b6f комплекс также служит источником протонов (через Q-цикл)
- Моделируется накопление и диффузия протонов в течение 25 ms

На рис. 3 показано, как в начале освещения происходят выбросы отдельных протонов в гранальной области, где расположены фотосистемы 2.

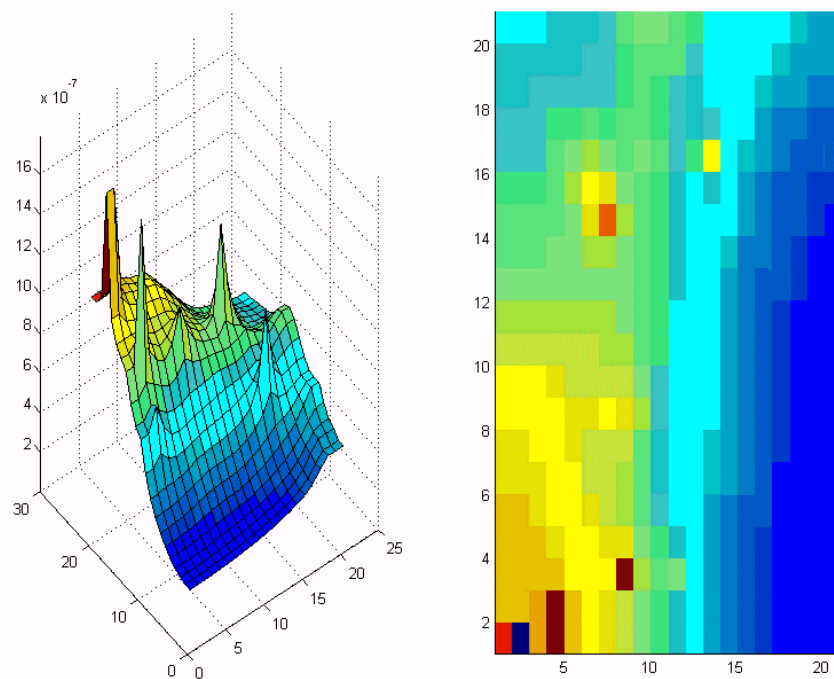


**Рис. 2. Начальная стадия освещения – выделение отдельных протонов, локальное повышение концентрации.**

В процессе диффузии наблюдается накопление протонов в гранальной части тилакоида, которое ведет к возникновению градиента рН между гранальным и стромальным участками фотосинтетической мембраны (рис. 4). В дальнейшем концентрация протонов в стромальной части возрастает, и начинается активный синтез АТФ. Также, появляются выбросы протонов непосредственно в стромальной части, так как электроны по цепи переносчиков доходят до цитохромных комплексов, расположенных в стромальной части (рис. 5).

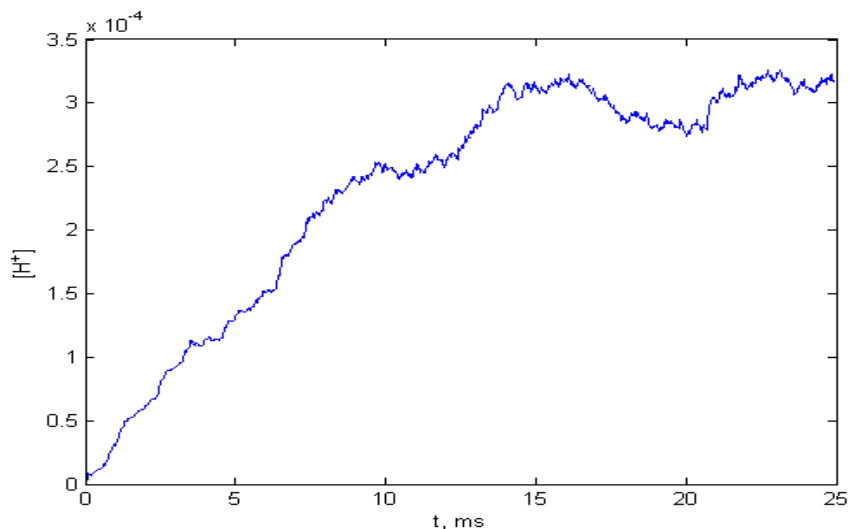


**Рис. 3. Градиент pH между гранальной и стромальной областями.**



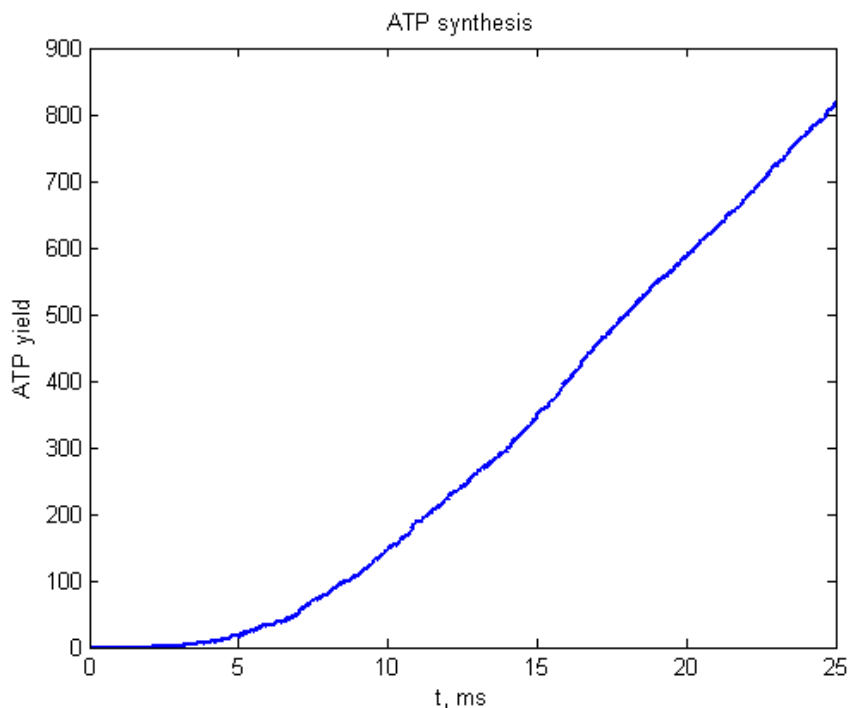
**Рис. 4. Увеличение концентрации в стромальной части. Слева сверху виден выброс протона через цитохромный комплекс в стромальной области.**

На рисунке 6 показана зависимость полной концентрации протонов в люмене от времени. Видно, что сначала концентрация возрастает, а затем выходит на примерно постоянный уровень с небольшими колебаниями.



**Рис. 5. Зависимость полной концентрации протонов в люмене от времени**

На графике на рисунке 7 показано выделение АТФ в зависимости от времени. Хорошо виден лаг-период в начале освещения, пока концентрация протонов в стромальной области недостаточна для синтеза АТФ. В дальнейшем выход АТФ нарастает, пока не выходит на линейную зависимость, по которой легко определить константу скорости синтеза АТФ для сравнения с экспериментальными данными.



**Рис. 6. Выход АТФ в зависимости от времени, освещенность 0.0001 (в единицах вероятности поглощения)**