

Оценка параметров прямой модели

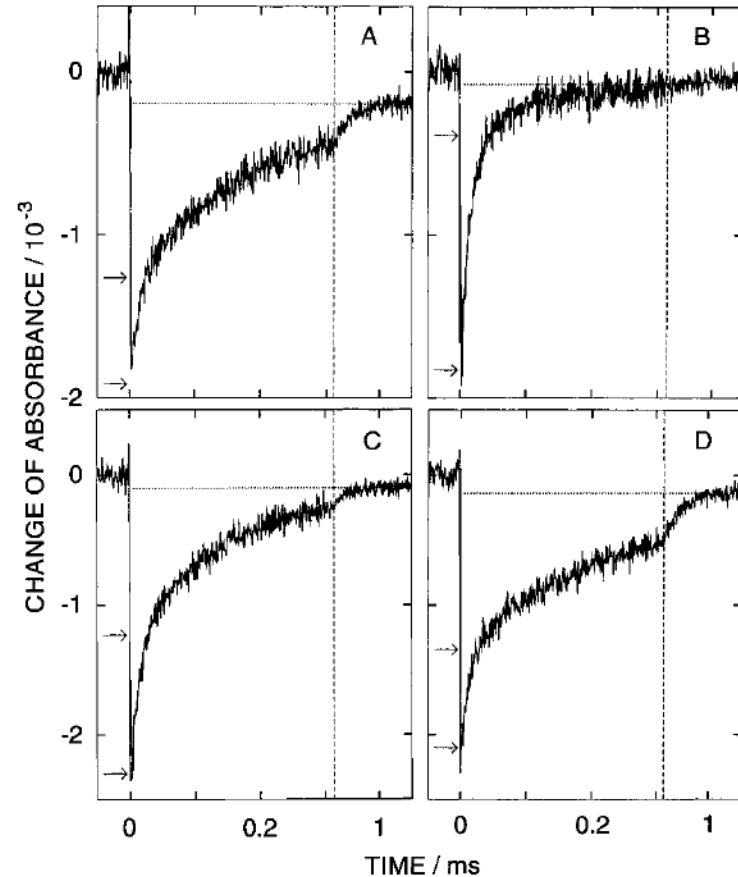
Определение констант связывания пластоцианина и ФС1 в растворе.

Важную проблему прямого моделирования представляет оценка параметров прямой модели из экспериментальных данных. Рассмотрим процесс оценки параметров прямой модели на основании сравнения модельных и экспериментальных кинетических кривых восстановления мультиферментного комплекса фотосистемы 1 подвижным переносчиком пластоцианином.

Drepper F., Hippler M., Nitschke W., Haehnel W. Binding Dynamics and Electron Transfer between Plastocyanin and Photosystem I // Biochemistry.- 1996.- V. 35.- P. 1282-1295.

Экспериментальные данные

В работе [1] исследовался перенос электрона между подвижным переносчиком пластоцианином и комплексом PSI на выделенных частицах в реакционном объеме. На рисунке представлены четыре кривые кинетики изменения редокс-состояния P700.



[1] Drepper F., Hippler M., Nitschke W., Haehnel W. Binding Dynamics and Electron Transfer between Plastocyanin and Photosystem I // Biochemistry.- 1996.- V. 35.- P. 1282-1295.

Экспериментальные данные

- Условия, при которых проводился эксперимент:
- Концентрация хлорофилла: $C_{Chl} = 95 \text{ мкг/мл} = 0.095 \text{ кг/м}^3$, отношение $Chl\ a / Chl\ b = 4.3$.
- Так как мол. масса хлорофилла $M=1 \text{ кг/моль}$, то $C_{Chl} = 5.7 \cdot 10^{22} \text{ шт/м}^3$. РЦ ФС1 содержит около 90 молекул $Chl\ a$ [2], и $Chl\ b$ сожержится только в антенне, а не в РЦ, то при данном соотношении $Chl\ a / Chl\ b$ на каждый комплекс ФС1 приходится примерно 200 молекул Chl . Таким образом, концентрация комплексов ФС1 в эксперименте $C_{ФС1} = 2.85 \cdot 10^{-7} \text{ шт/нм}^3$.
- Концентрация пластоцианина для случаев А, В, С и D представлена в таблице:

	А	В	С	Д
Концентрация Рс, мкМ (восстановл. +окисл.)	27	250	54	54+196

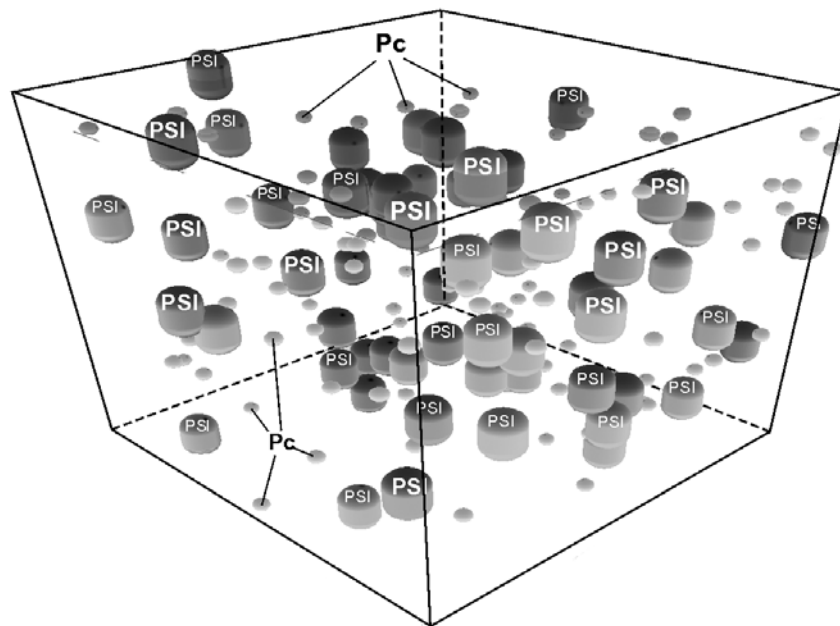
Экспериментальные данные

Представляя модельную кинетическую кривую изменения редокс-состояния комплекса фотосистемы 1 в виде суммы двух убывающих экспонент, можно сравнить характеристики модельной и экспериментальной кривых. Амплитуды и характерные времена экспонент, полученные при разложении экспериментальной кривой восстановления P700, представлены в таблице. Нижний индекс 1 обозначает быстрый компонент, 2 – медленный компонент.

	A	B	C	D
τ_1 , мкс	16	16	14	15
A_1	0.37	0.82	0.49	0.39
τ_2 , мкс	206	116	151	271
A_2	0.62	0.18	0.51	0.61

Визуализация модели взаимодействия подвижных переносчиков и комплексов на выделенных частицах в растворе (пример: PSI и Pc, не в масштабе).

Моделируемый реакционный объем выбирали кубической формы, комплексы и подвижные переносчики распределяли в реакционном объеме равномерно, в соответствии с использованными в эксперименте концентрациями.



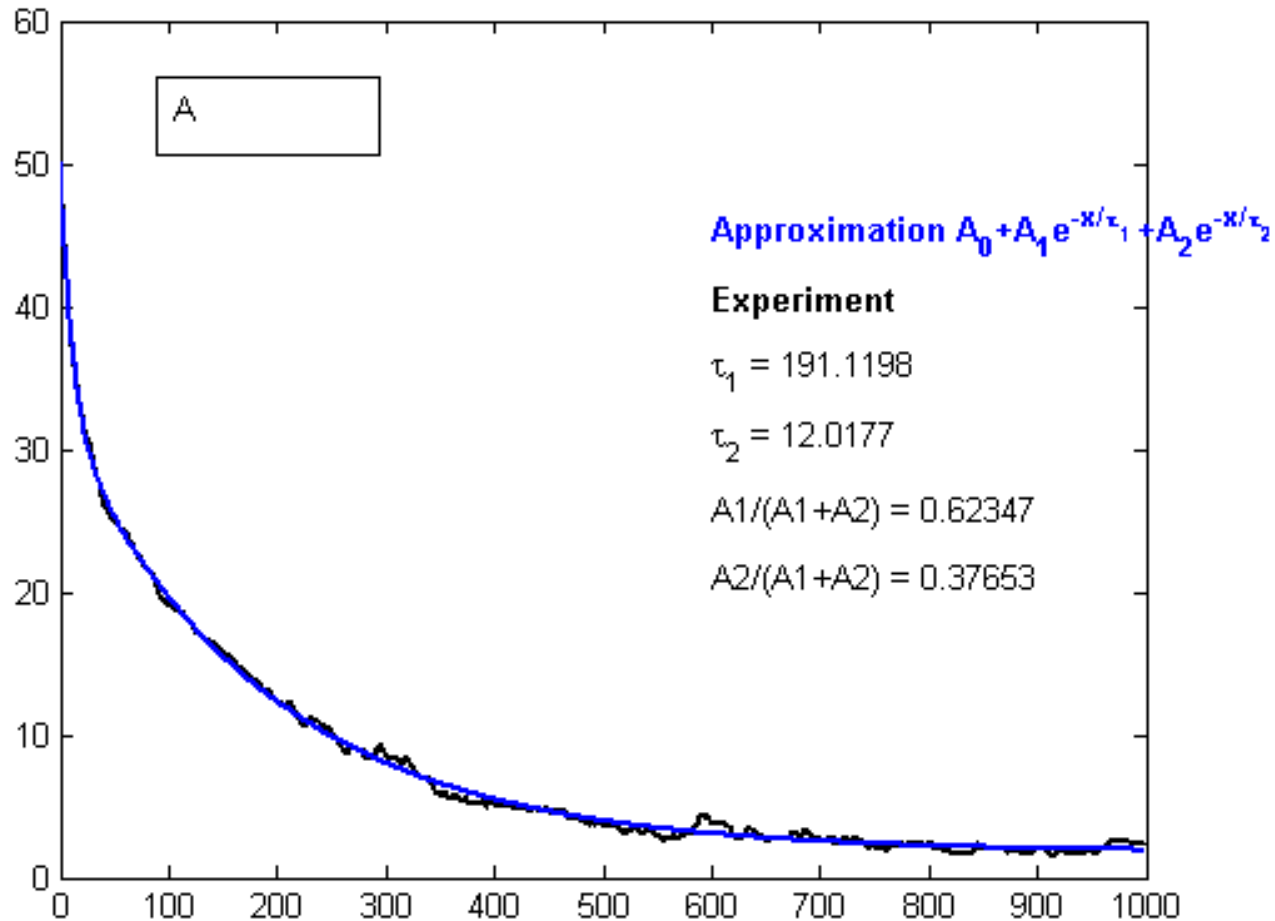
Моделирование восстановления P700 пластоцианином в растворе

Изменяя параметры прямой модели (вероятность связывания подвижного переносчика с комплексом, эффективное расстояние взаимодействия, характерное время переноса электрона), можно добиться совпадения экспериментальной и модельной кривых изменения редокс-состояний подвижного переносчика и комплекса.

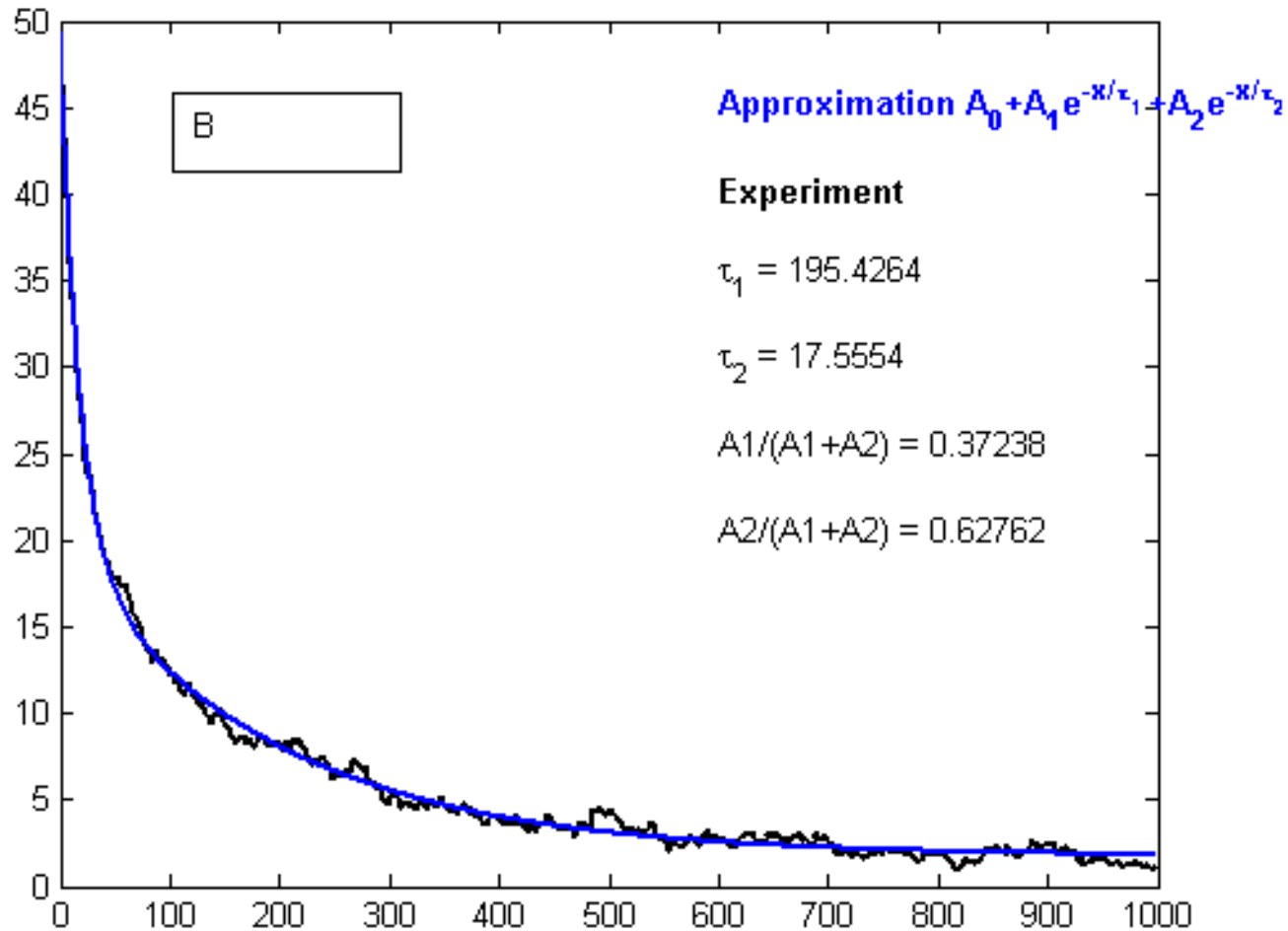
Значения параметров прямой модели для реакции Pс и P700 (p – вероятность, τ – характерное время процесса). Верхними индексами I и II обозначен восстановленный и окисленный Pс, знаком + обозначена PSI с окисленным P700.

p_{on}^{I}	$p_{\text{on}}^{\text{I},+}$	$p_{\text{on}}^{\text{II}}$	$p_{\text{on}}^{\text{II},+}$	$\tau_{\text{off}}^{\text{I}}, \text{мкс}$	$\tau_{\text{off}}^{\text{I},+}, \text{мкс}$	$\tau_{\text{off}}^{\text{II}}, \text{мкс}$	$\tau_{\text{off}}^{\text{II},+}, \text{мкс}$	$\tau_{\text{et}}, \text{мкс}$	$\tau_{\text{bet}}, \text{мкс}$
0.05	0.5	0.001	0.05	20	10	100	16	17	220

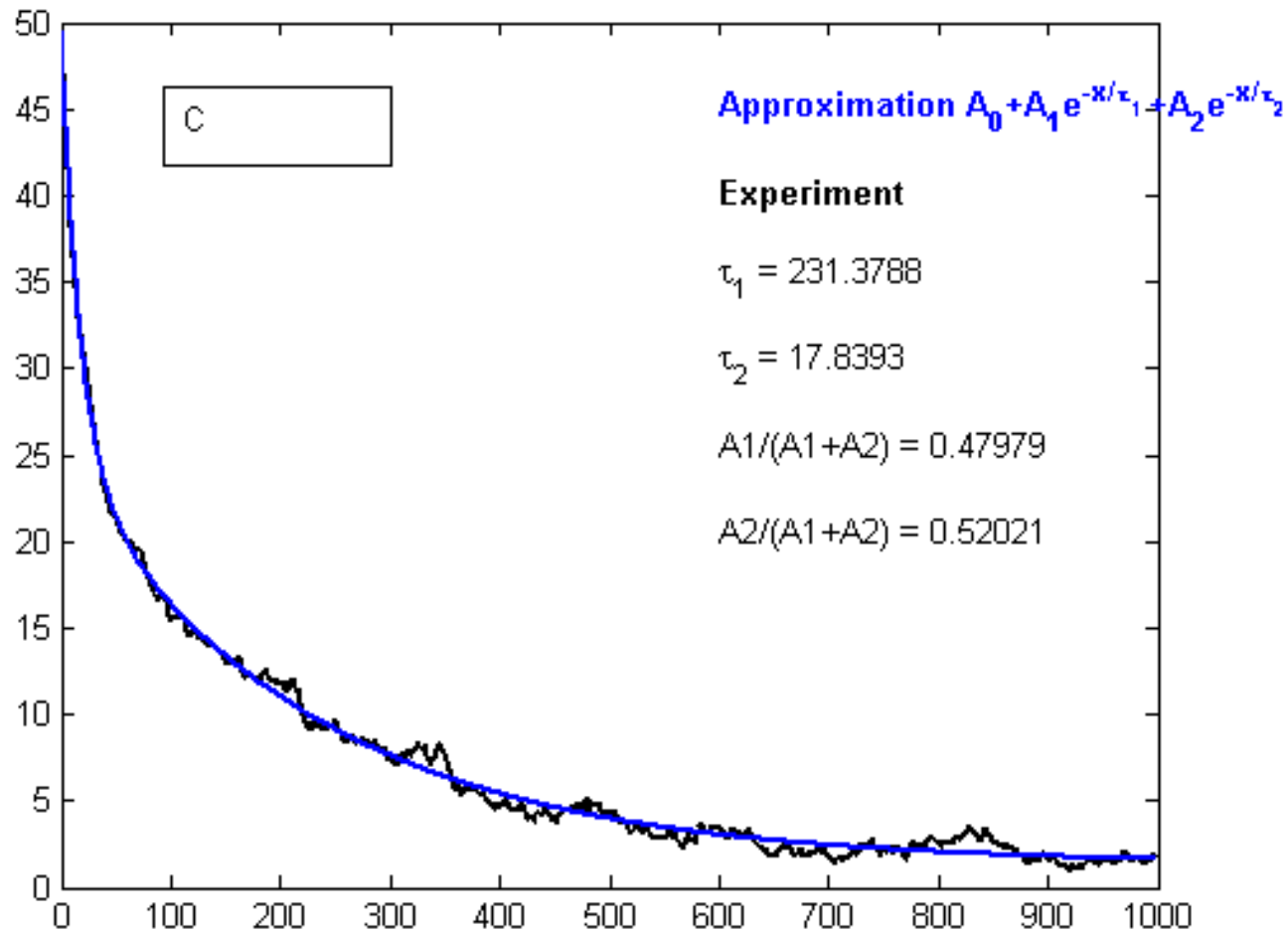
Моделирование экспериментальной ситуации А



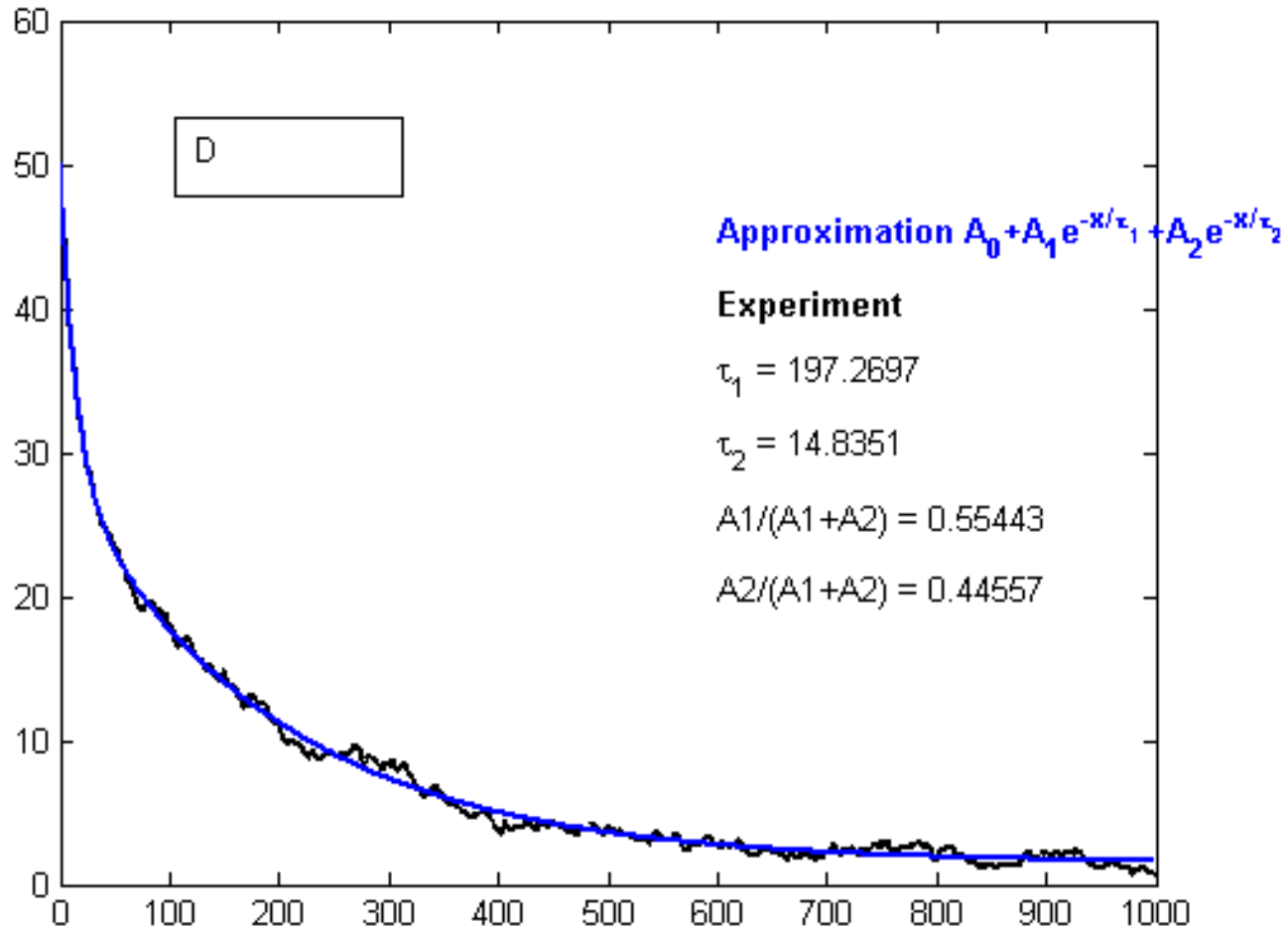
Моделирование экспериментальной ситуации В



Моделирование экспериментальной ситуации С



Моделирование экспериментальной ситуации D



Модельные данные

Представляя модельную кинетическую кривую изменения редокс-состояния комплекса фотосистемы 1 в виде суммы двух убывающих экспонент, можно сравнить характеристики модельной и экспериментальной кривых. Амплитуды и характерные времена экспонент, полученные при разложении экспериментальной кривой восстановления P700, представлены в таблице. Нижний индекс 1 обозначает быстрый компонент, 2 – медленный компонент. Мы получили значения кинетических констант и времен реакций, очень близкие к экспериментальным значениям.

	A	B	C	D
τ_1 , мкс	12	17	17	15
A_1	0.37	0.62	0.52	0.44
τ_2 , мкс	191	195	231	197
A_2	0.62	0.37	0.48	0.56