

# **МОДЕЛИРОВАНИЕ ИНДУКЦИИ И ЗАТУХАНИЯ ФЛУОРЕСЦЕНЦИИ И КИНЕТИКИ ИЗМЕНЕНИЯ РЕДОКС СОСТОЯНИЯ P700 С ПОМОЩЬЮ КИНЕТИЧЕСКОГО МЕТОДА МОНТЕ-КАРЛО**

**Маслаков А.С.**

Московский государственный университет им. М.В.Ломоносова, Биологический факультет, каф. биофизики, Россия, 119234, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 12, alexei.maslakov@gmail.com

В последнее время в исследованиях сложных метаболических процессов всё чаще применяется кинетический метод Монте-Карло. В этом методе используется генерация случайных чисел для имитации случайных событий, происходящих при биохимических окислительно-восстановительных реакциях или при переносе энергии в фотосинтетических процессах. Происходящие в системе случайные события приводят к изменению редокс состояний отдельных переносчиков, к высвечиванию или поглощению квантов света.

Представленная модельная система - это набор 3-5 млн элементов, каждый из которых представляет собой фотосинтетическую электронтранспортную цепь, состоящую из фотосистемы 2, 6 молекул пула пластохинона, 1 цитохромного b6/f комплекса, 2 молекул пластоцианина, фотосистемы 1 и 6 молекул ферредоксина.

Предложенная модель позволяет детально изучить взаимосвязь процессов, происходящих в фотосинтетической электронтранспортной цепи, с изменениями в КИФ, а также других кинетических кривых, которые можно получить экспериментально (например фотоиндуцированное изменение поглощения в области 820 или 705 нм, обусловленное изменением редокс состояния хлорофилла реакционного центра фотосистемы 1 P700). Благодаря хорошей детализации, модель позволяет имитировать изменения в электронтранспортной цепи, возникающие при различных условиях (различного рода стрессовые воздействия и действие ингибиторов фотосинтеза).

На сегодняшний день широко распространены кинетические модели фотосинтетических процессов. Количество уравнений в таких системах может достигать нескольких тысяч, при этом любые изменения, например, добавление новых переносчиков, затрагивают значительную их часть. В отличие от них, представленный вид моделей состоит из набора правил, каждое из которых зависит лишь от небольшого окружения или вовсе от других правил не зависит, что позволяет модифицировать модель с минимальными трудозатратами.

Для верификации модели симулировали кривую индукции флуоресценции хлорофилла а (ОЛР) при различных параметрах. Для валидации использовались экспериментальные кривые, полученные после различных воздействий на растения, в том числе после обработки различными видами ингибиторов фотосинтеза, после теплового шока, в анаэробных условиях и при возбуждении светом высокой интенсивности.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-34-00406 мол\_а.