

# МОДЕЛЬ СТРОМАЛЬНЫХ И ГРАНАЛЬНЫХ ЛАМЕЛЛ ХЛОРОПЛАСТА С РЕАЛИСТИЧНОЙ ГЕОМЕТРИЕЙ КОМПАРТМЕНТОВ<sup>1</sup>

**Хрущев С.С., Федоров В.А., Устинин Д.М.,  
Коваленко И.Б., Ризниченко Г.Ю., Рубин А.Б.**

Московский государственный университет им. М.В.Ломоносова, Биологический факультет, каф. биофизики, Россия, 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 12, [styx@biophys.msu.ru](mailto:styx@biophys.msu.ru)

Разработана структура модели стромальных и гранальных ламелл хлоропласта с реалистичной геометрией этих субклеточных компартментов и явным учетом диффузии подвижных переносчиков электрона. В модели рассматриваются процессы электронного и протонного транспорта в тилакоидной мембране хлоропласта с участием трансмембранных комплексов: фотосистем 1 и 2, цитохромного b6/f комплекса и АТФ-синтазы. Для описания окислительно-восстановительных реакций, происходящих в трансмембранных белковых комплексах с участием мобильных переносчиков, будет использоваться основанный на шаблонах (rule-based) метод. Метод микроэлектронной томографии позволяет получить детальную реконструкцию формы стромальных и гранальных ламелл хлоропласта [1]. При компьютерном моделировании возможно использование геометрии модельной сцены, точно воспроизводящей полученную в эксперименте форму фрагмента хлоропласта. Однако интерпретация результатов моделирования была бы крайне затруднительна, так как в такой модели невозможно проследить, каким образом изменение геометрических размеров отдельных компартментов влияет на биологические процессы. На основе томографических данных создана упрощенная аналитическая модель геометрии фрагмента хлоропласта, содержащего грану и соединяющиеся с ней стромальные ламеллы, позволяющая варьировать форму компартментов изменением числовых параметров. По литературным данным получены оценки размеров гранальных и стромальных ламелл и соединительных мостиков между ними, параметры поверхностной плотности трансмембранных белковых комплексов и концентрации мобильных переносчиков электронов – пластохинона, пластоцианина и ферредоксина. Разработано программное обеспечение для моделирования первичных процессов фотосинтеза с учетом связанных с геометрией компартментов и расположением трансмембранных белковых комплексов ограничений на диффузию мобильных переносчиков электронов и протонов. Программное обеспечение реализует предложенный ранее метод прямого компьютерного моделирования процессов [2]. Диффузия мобильных переносчиков электронов моделируется с помощью метода броуновской динамики, при этом используется упрощенный подход, в котором не рассматриваются электростатические взаимодействия между молекулами. Форма компартментов и трансмембранных белковых комплексов задается аналитически, на каждом шаге моделирования производится проверка столкновений мобильных переносчиков электрона с границами компартмента и трансмембранными комплексами.

## Литература

1. Bussi et al. Fundamental helical geometry consolidates the plant photosynthetic membrane // PNAS, 2019, v. 116(44), pp. 22366-22375. DOI: 10.1073/pnas.1905994116
2. Ризниченко и др. Модели фотосинтетического электронного транспорта // Биофизика, 2020, Т. 65, № 5. С. 886–902. DOI: 10.31857/S0006302920050063

<sup>1</sup> Исследование выполнено в рамках научного проекта государственного задания МГУ №121032500060-0 при частичной поддержке гранта РФФИ № 20-04-00465.