

# ОГЛАВЛЕНИЕ

<b>ПРЕДИСЛОВИЕ</b> .....	9
<b>ВВЕДЕНИЕ</b> .....	11
В1. Модели биологических процессов. Системно-динамические и агентные модели.....	11
В2. История исследования фотосинтеза.....	16
В3. Фотосинтетическая мембрана и протекающие в ней процессы.....	20
<b>I. КИНЕТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ ФОТОСИНТЕТИЧЕСКОГО ЭЛЕКТРОННОГО ТРАНСПОРТА</b> .....	29
<b>I.1. Базовые модели</b> .....	30
1.1. Перенос электронов в мультиферментном комплексе. Уравнения для вероятностей состояний комплекса .....	30
1.2. Перенос электрона в комплексе двух переносчиков .....	31
1.3. Перенос электрона в комплексе <i>n</i> переносчиков .....	33
1.4. Взаимодействие мультиферментных комплексов с подвижными переносчиками .....	35
1.5. Перенос электрона в изолированном фотореакционном центре...38	
1.6. Типы регуляции фотосинтетических процессов.....	39
1.7. Базовая модель взаимодействия двух фотосистем .....	41
Уравнения для вероятностей состояний фотосистемы II .....	43
Схема состояний ФС II .....	44
Процесс разделения зарядов .....	44
Передача электрона из донорной части в РЦ ФС II.....	45
Передача электрона от ФС II в пул хинонов .....	46
Уравнения для вероятностей состояний фотосистемы I.....	47
Передача электрона из донорной части в РЦ ФС I.....	48
1.8. Уравнения, описывающие изменение степени восстановленности подвижных переносчиков.....	50
<b>I.2. Моделирование электронного транспорта и сопряженных процессов в фотосистеме II</b> .....	52
2.1. Кинетика флуоресценции хлорофилла .....	52

Переменная и постоянная флуоресценция .....	53
Кривая индукции флуоресценции хлорофилла.....	55
Происхождение переменной флуоресценции хлорофилла <i>a</i> .....	57
2.2. Модель переноса электрона в комплексе фотосистемы II.....	58
Схема состояний комплекса фотосистемы II .....	60
Приток электронов от водоразлагающего комплекса .....	63
Процессы диссипации энергии .....	66
Учет электрического и электрохимического потенциала на мембране.....	66
Описание кинетики формирования $\Delta\Psi (t)$ , рН люмена и стромы	67
2.3. Моделирование кинетики выхода флуоресценции после освещения насыщающим наносекундным лазерным импульсом.	68
Оценка констант скоростей процессов безызлучательной диссипации энергии в реакционном центре ФС II при разных интенсивностях света.....	72
2.4. Моделирование нарастающего участка индукции флуоресценции в ответ на включение постоянного света.....	74
<b>I.3. Детальная модель процессов в фотосинтетической мембране.....</b>	<b>78</b>
Общая схема процессов .....	78
3.1. Цитохромный комплекс.....	80
Q-цикл Митчелла.....	80
Модель. Схема состояний.....	83
Вероятности состояний комплекса.....	85
Концентрации подвижных переносчиков.....	87
Концентрация протонов в люмене .....	87
3.2. Комплекс фотосистемы I .....	91
Природа медленной стадии восстановления P700.....	92
3.3. Транспорт электрона подвижными переносчиками .....	96
3.4. Трансмембранный электрохимический потенциал, перенос ионов через мембрану и буферные свойства мембраны .....	97
3.5. Оценка параметров кинетической модели. Проблемы идентификации .....	98
3.6. Фитирование параметров модели по экспериментальным кривым индукции флуоресценции и кинетике редокс- превращений P700 .....	100
Кинетика изменения во времени электрического и электрохимического потенциала .....	104
Динамика состояний ФС II.....	105

PQ-пул, Cyt $b_6f$ и компоненты ФС I.....	106
Линейный и циклический потоки электронов .....	108
<b>I.4. Анализ больших массивов данных. Упрощенные модели .....</b>	<b>112</b>
4.1. Аппроксимация нарастающего участка кривой флуоресценции экспоненциальными функциями .....	112
4.2. Мультиэкспоненциальная аппроксимация. Спектральный анализ.....	114
4.3. Мониторинг фотосинтетической активности культуры микрово- дорослей при истощении азота в среде .....	119
Изменение спектральных характеристик и параметров индукци- онной кривой флуоресценции в процессе роста культуры.....	121
Теплокарты динамики изменения компонентного состава кривых ОКЛР.....	122
4.4. Связь упрощенных и детальных моделей.....	126
Редукция детальной схемы.....	128
Верификация модели .....	130
<b>I.5. Переключение режимов функционирования фотосинтетической     цепи в условиях минерального голодания.....</b>	<b>134</b>
5.1. Изменения электрон-транспортной системы в условиях стресса. Роль хлородыхания .....	134
5.2. Модель переключения электронных потоков .....	137
Иерархия времен в системе .....	140
Миллисекундный временной диапазон. Перенос электронов в ФС II.....	143
Секундный временной диапазон. Изменение концентрации протонов в строме вблизи ФС II .....	144
Ответ системы на изменение параметров.....	146
5.3. Процессы, протекающие в часовом временном диапазоне. Восстановленность пула пластохинонов. Роль хлородыхания ...	147
Нелинейный механизм кинетической регуляции.....	148
<b>I.6. Прямой кинетический метод Монте-Карло. Описание процессов     в ансамблях фотосинтетических реакционных центров.....</b>	<b>152</b>
6.1. Организация модели.....	154
Структура модели.....	154
Параметры модели .....	157
Алгоритм моделирования.....	160

6.2. Энергетическая связь между реакционными центрами в димере ФС II .....	163
Альфа- и бета-центры .....	164
6.3. Верификация модели по экспериментальным данным .....	166
Влияние интенсивности света на форму кривой индукции флуоресценции.....	168
Моделирование действия ингибиторов .....	170
6.4. Возможности кинетического метода Монте-Карло .....	175
<b>II. МНОГОЧАСТИЧНОЕ КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ .....</b>	<b>178</b>
Диффузионно-контролируемые реакции .....	179
<b>II.1. Принципы построения многочастичной броуновской модели.</b>	<b>182</b>
1.1. Формирование сцены и расположение объектов .....	183
1.2. Моделирование броуновского движения. Уравнение Ланжевена .....	186
Решение уравнения Ланжевена.....	187
1.3. Модель взаимодействия фотосинтетических белков без учета электрических сил .....	188
1.4. Учет столкновений и взаимодействие с белковыми комплексами. Радиус и вероятность взаимодействия .....	190
1.5. Метод броуновской динамики (BD) и прямые многочастичные модели.....	193
1.6. Сопряжение математических способов описания различных процессов в тилакоидной мембране в компьютерной модели ....	194
Моделирование переноса электрона с мобильного переносчика на белковый комплекс и переноса внутри комплексов.....	197
Моделирование протонного транспорта.....	198
Модель выделения протонов в люмен .....	199
Модель латеральной диффузии протонов .....	201
Моделирование утечки протонов через АТФ-синтазу и синтеза АТФ.....	203
Программная реализация.....	204
<b>II.2. Моделирование белок-белковых взаимодействий в растворе ..</b>	<b>206</b>
2.1. Стадии белок-белковых взаимодействий .....	206
2.2. Описание диффузии белков. Аппроксимация эллипсоидами вращения.....	209

2.3. Моделирование столкновений белков. Описание формы белков в виде набора сфер .....	212
2.4. Моделирование электростатических взаимодействий .....	212
Расчет электростатической силы в моделях броуновской динамики .....	214
Эквипотенциальные поверхности белков.....	215
2.5. Оценка константы скорости взаимодействия белков на основе сравнения результатов компьютерных и реальных экспериментов в растворе.....	219
<b>II.3. Роль электростатических взаимодействий в процессах взаимодействия белков — переносчиков электрона при фотосинтезе .....</b>	<b>223</b>
3.1. Влияние поверхностных зарядов на скорость взаимодействия белков.....	223
3.2. Зависимость константы скорости образования комплекса от ионной силы раствора для дикого типа и мутантных форм ...	226
3.3. Диффузионный захват. Продуктивные и непродуктивные диффузионно-столкновительные комплексы .....	231
3.4. Роль электростатических взаимодействий в процессе диффузионного сближения и докинга электрон-транспортных белков.....	234
3.5. Сравнительный анализ взаимодействия Pс с Cyt <i>f</i> и реакционными центрами ФС I высших растений и цианобактерий. Роль электростатических взаимодействий .....	237
<b>II.4. Броуновское/молекулярное моделирование образования комплекса электрон-транспортных белков .....</b>	<b>243</b>
4.1. Молекулярное моделирование формирования комплекса Pс Cyt <i>f</i> растений, зеленых микроводорослей и циановых бактерий.....	243
4.2. Сравнительный анализ роли электростатических взаимодействий у растений и циановых бактерий .....	244
<b>II.5. Многочастичная броуновская модель переключения электронных потоков в акцепторной части ФС I с пути фиксации CO<sub>2</sub> на путь выделения водорода .....</b>	<b>249</b>
5.1. Особенности фотосинтеза в водородвыделяющих микроводорослях .....	249

5.2. Модельные зависимости констант скоростей процессов образования комплексов ферредоксина с ФНР и гидрогеназой от pH среды .....	251
5.3. Электростатические свойства взаимодействующих молекул при разных pH.....	254
<b>II.6. Процессы взаимодействия белков в люмене тилакоида.....</b>	<b>261</b>
6.1. Описание трехмерного реакционного объема — модельной спелы тилакоида.....	263
6.2. Влияние электростатического поля фотосинтетической мембраны на реакцию взаимодействия пластоцианина с цитохромом <i>f</i> в люмене тилакоида .....	267
6.3. Компьютерное моделирование переноса электрона по цепи фотосинтетического транспорта подвижным белком переносчиком Pс в люмене тилакоида.....	272
<b>ОБСУЖДЕНИЕ. ПЕРСПЕКТИВЫ .....</b>	<b>282</b>
<b>ЗАКЛЮЧЕНИЕ .....</b>	<b>288</b>
<b>ЛИТЕРАТУРА.....</b>	<b>291</b>