

УСОВЕРШЕНСТВОВАННЫЙ ПОДХОД К ОПИСАНИЮ ЭЛЕКТРОННОГО ТРАНСПОРТА ПРИ ПРЯМОМ МНОГОЧАСТИЧНОМ МОДЕЛИРОВАНИИ ФОТОСИНТЕТИЧЕСКИХ МЕМБРАН

Мамонов П.А., Коваленко И.Б., Хрущев С.С., Рубин А.Б.

МГУ им. Ломоносова, Биологический ф-т, каф. Биофизики,
Россия, 119992, Москва, Ленинские горы, МГУ,
тел. +74959394367, e-mail: piton@erg.biophys.msu.ru

Точное количественное описание акта переноса электрона между активными центрами участников ЭТЦ из первых принципов представляет сложную в решении задачу. В настоящей работе предлагается простой феноменологический подход к описанию процесса переноса электрона между участниками электрон-транспортной цепи (ЭТЦ) при прямом многочастичном моделировании фотосинтетических мембран [1]. Экспериментальные измерения показывают, что зависимость константы скорости реакции электронного переноса может быть аппроксимирована экспоненциальной функцией вида: $k = A e^{-\beta r}$ (1), с показателем экспоненты варьирующим в пределах от 0.8 \AA^{-1} [2] до 1.7 \AA^{-1} [3]. Данное приближение позволяет рассчитать степень протекания реакции переноса электрона между донором и акцептором по мере их взаимных перемещений. Для интеграции данного подхода в алгоритм многочастичного моделирования необходимо дополнить объектную модель участника ЭТЦ параметром e отражающим вероятность обнаружить его в восстановленном состоянии, варьирующим от 0 до n , где n - количество электронов, которые может принять данный окислительно-восстановительный центр. Степень восстановленности e_i i -го центра может быть определена путем интегрирования системы уравнений вида:
$$\frac{de_i}{dt} = \sum_{i \neq j} k_{ij} e_j (n_i - e_i) - k_{ji} e_i (n_j - e_j)$$
, где k_{ij} , k_{ji} – константы скорости прямой и обратной реакций обмена между центрами i и j , зависящие от расстояния между центрами согласно (1). В свою очередь индивидуальные степени восстановленности окислительно-восстановительных центров могут быть усреднены по ансамблю частиц одного вида для оценки окислительно-восстановительного состояния всего пула однотипных частиц.

Работа поддержана грантами РФФИ 12-07-33036-мол_a_вед, 12-04-31839-мол_a, 11-04-01019-a, 11-04-01268-a.

Литература

1. Kovalenko I.B., Abaturova A.M., Gromov P.A., Ustinin D.M., Grachev E.A., Rznichenko G.Yu., Rubin A.B. Direct simulation of plastocyanin and cytochrome f interactions in solution // *Phys. Biol.*, 3, 2006, 121–129
2. J.R. Winkler, H.B. Gray Electron transfer in ruthenium-modified proteins// *Chem.Rev.* 92, 1992, 369-379
3. A.Ponce, H.B. Gray, and J.R. Winkler Electron Tunneling through Water: Oxidative Quenching of Electronically Excited Ru(tpy)₂²⁺ (tpy = 2,2'-6,2''-terpyridine) by Ferric Ions in Aqueous Glasses at 77 K // *J.Am.Chem.Soc.* 122, 34, 2000, 8187-8191