

# Математические модели переноса электронов в процессах фотосинтеза

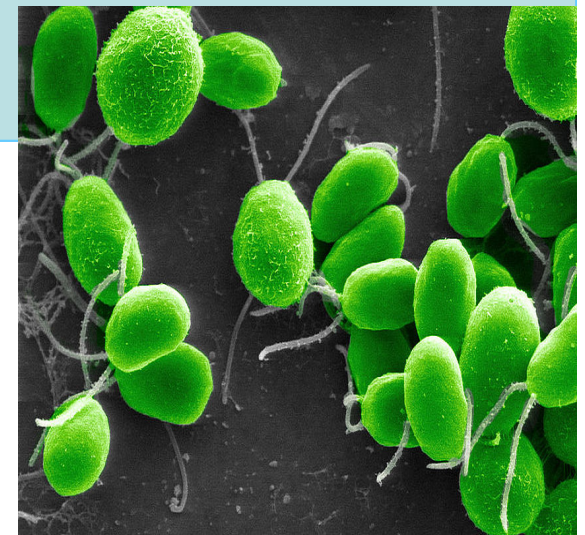
Галина Юрьевна Ризниченко

Кафедра биофизики

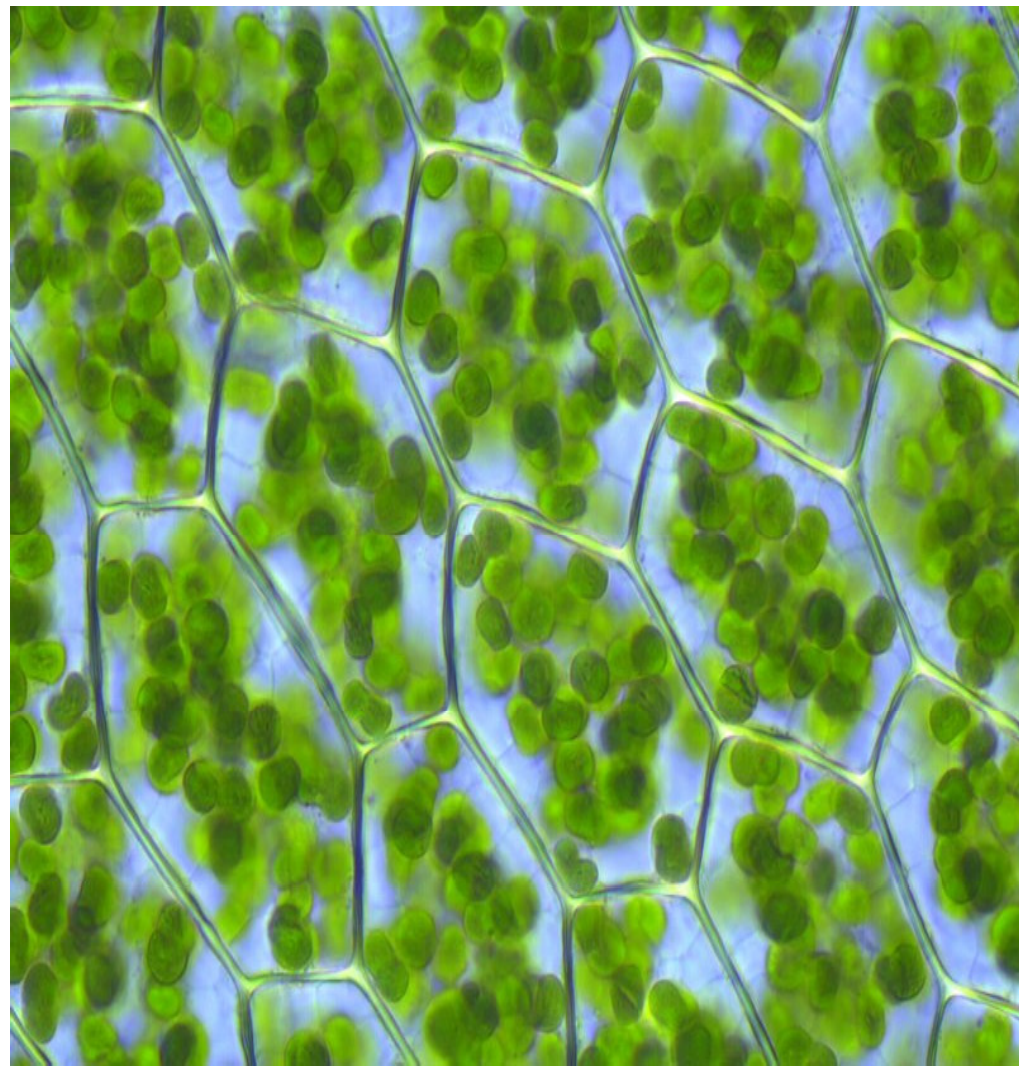
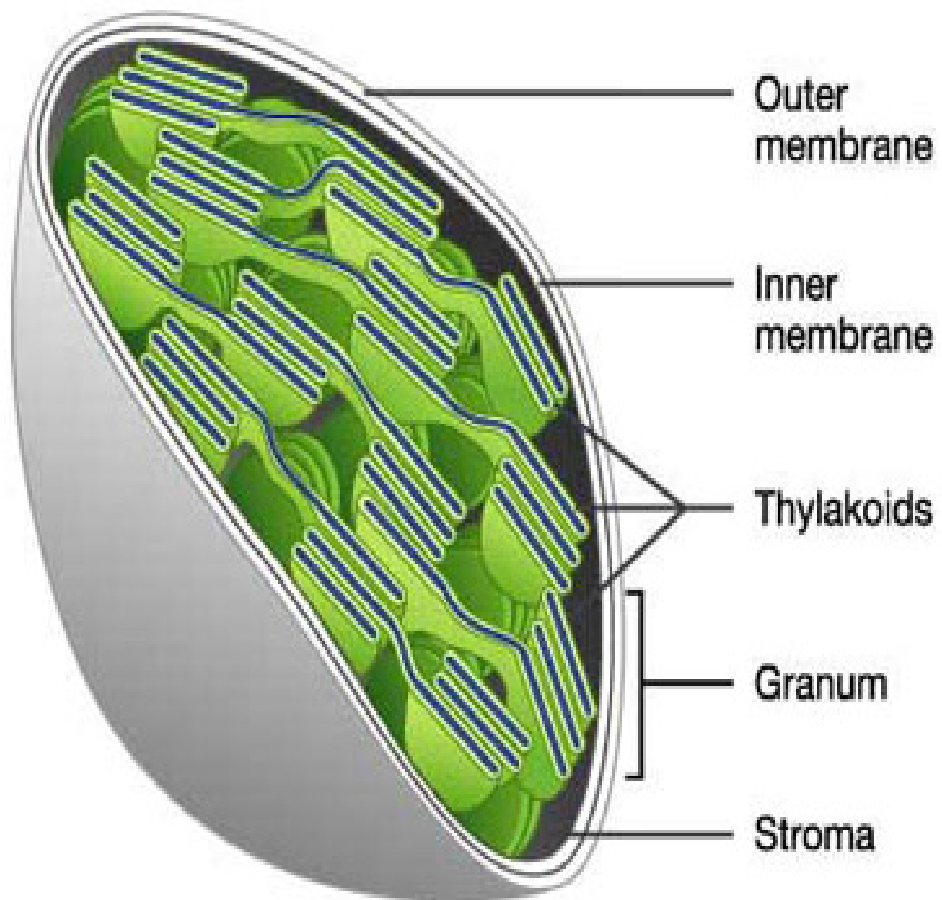
биологического ф-та МГУ имени  
М.В.Ломоносова +7(095)9390289;

[riznich@biophys.msu.ru](mailto:riznich@biophys.msu.ru)

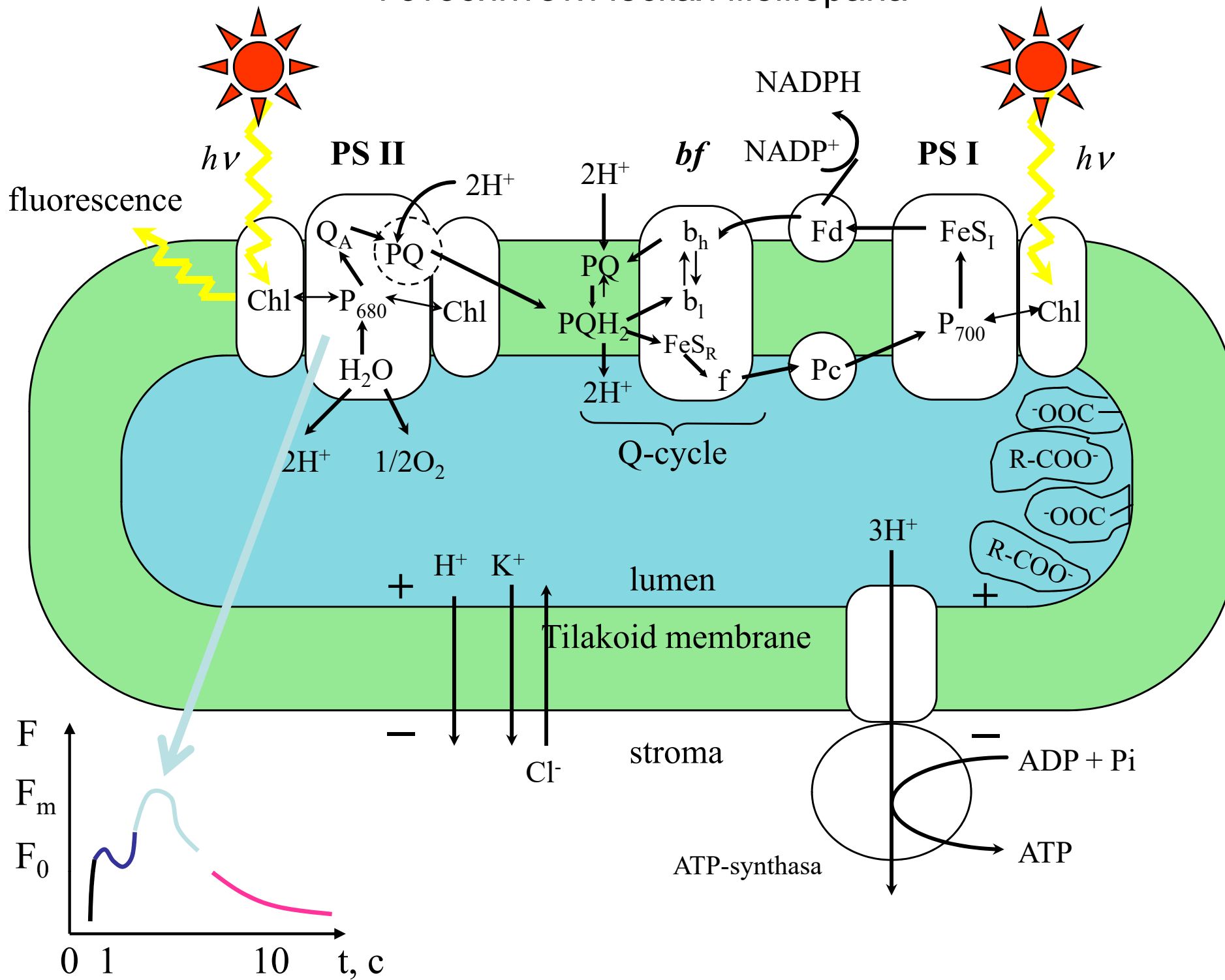
Нижний Новгород 11 ноября 2022



# Хлоропласт.



# Фотосинтетическая мембрана









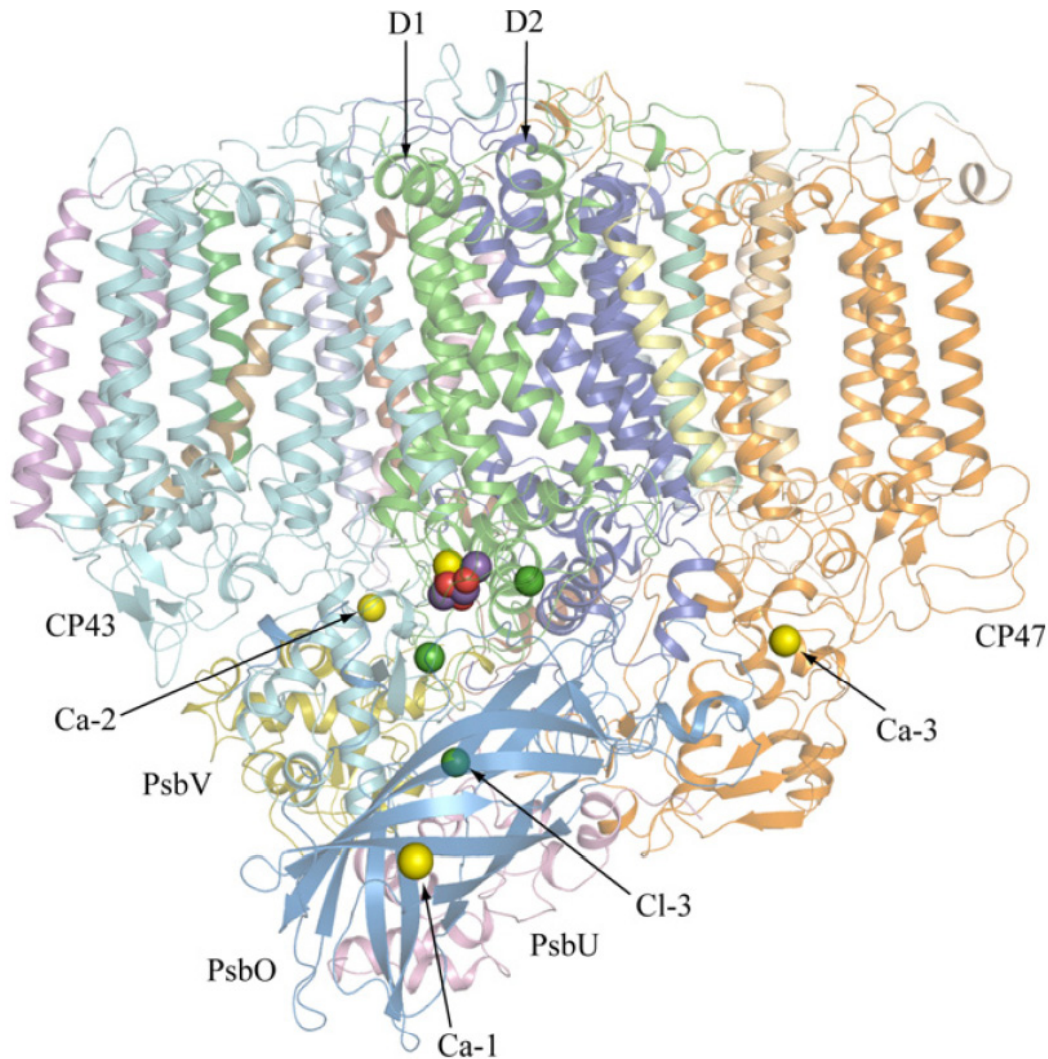
# Кинетические МОДЕЛИ

Понятие концентрации  
Закон действующих масс

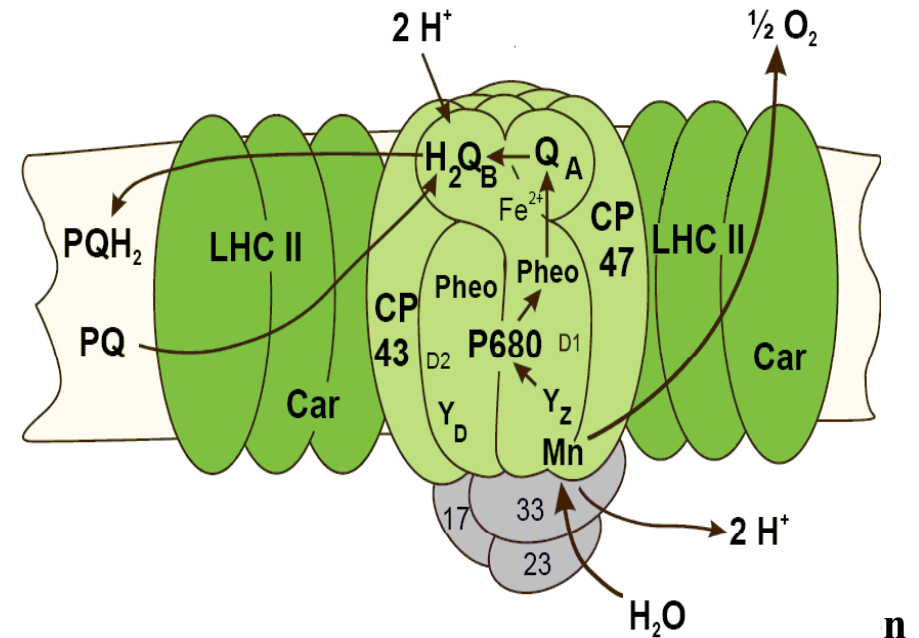
## ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫЕ УРАВНЕНИЯ

**ПЕРЕМЕННЫЕ: ВЕРОЯТНОСТИ  
СОСТОЯНИЙ МУЛЬТИФЕРМЕНТНЫХ  
КОМПЛЕКСОВ И КОНЦЕНТРАЦИИ  
ПОДВИЖНЫХ ПЕРЕНОСЧИКОВ**

# Фотосистема 2 – источник флуоресценции



**Kawakami K, Umena Y, Kamiya N, Shen J-R.**  
**Structure of the catalytic, inorganic core of oxygen-**  
**evolving photosystem II at 1.9 Å resolution.**  
**J Photochem Photobiol B: Biology 104 (2011) 9–18**

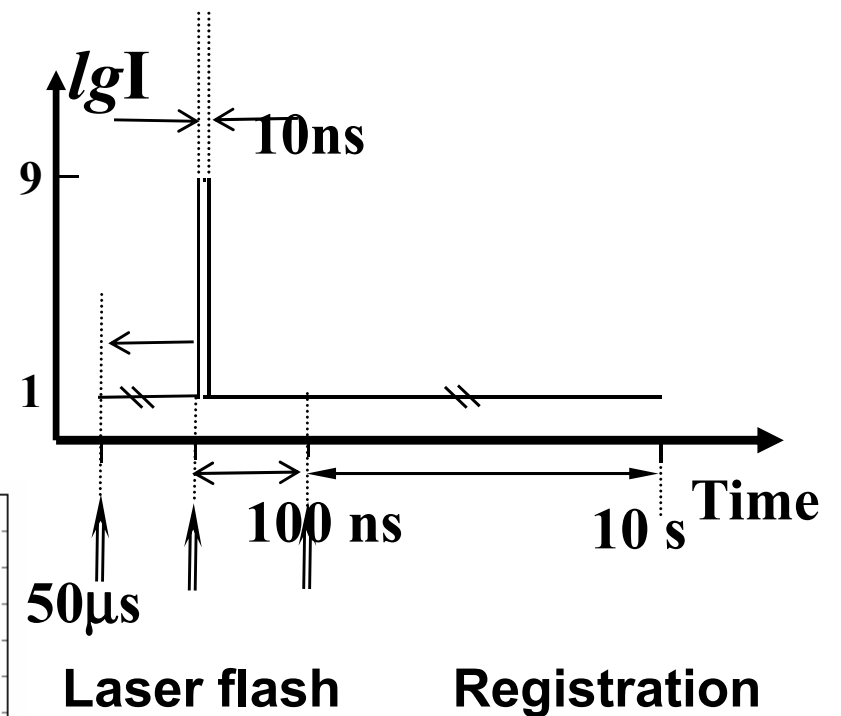
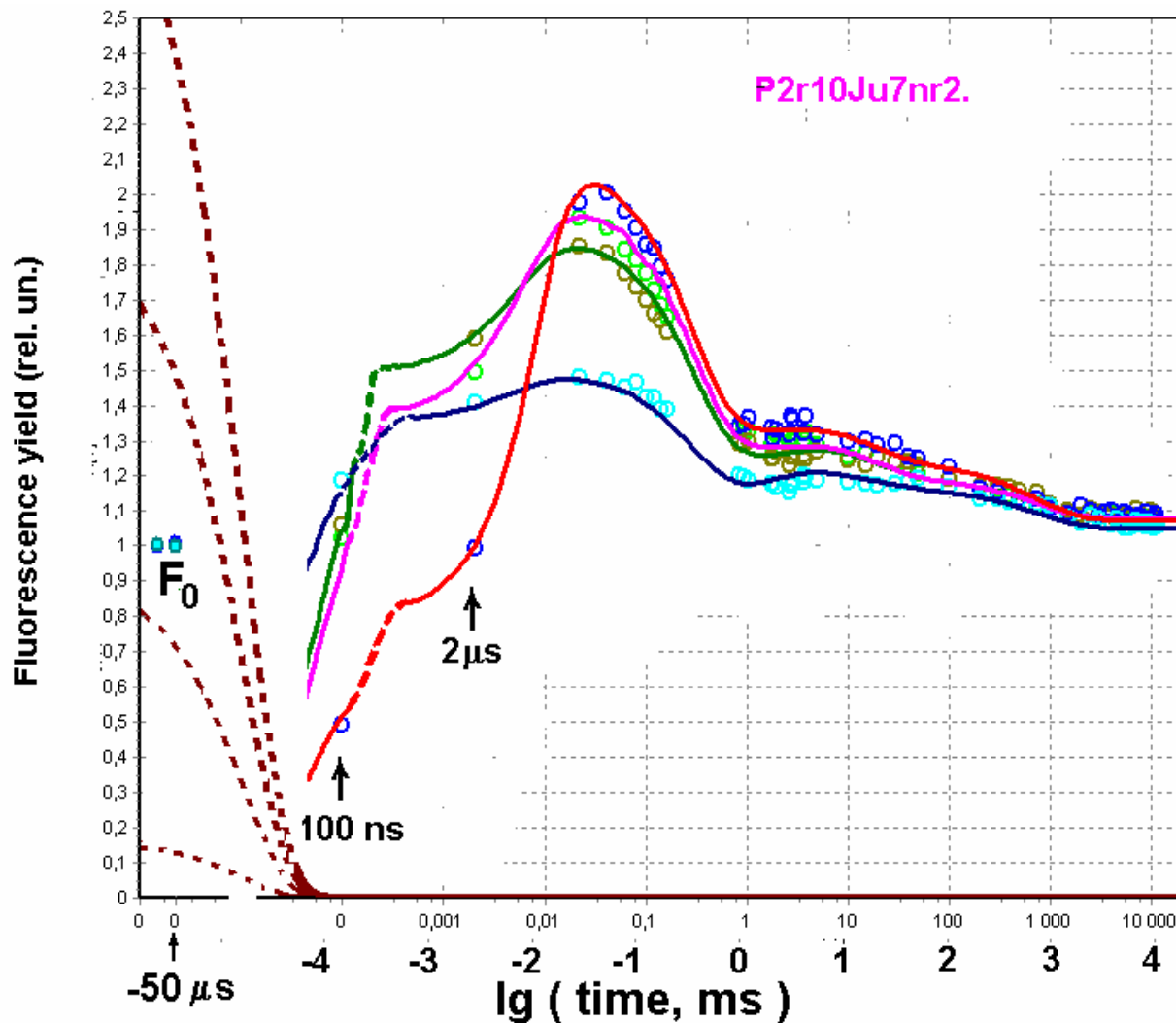


**Chl, PSII chlorophyll, P680**  
**- photoactive pigments;**  
**Phe, pheophytin;  $Q_A$  and**  
 **$Q_B$ , primary and**  
**secondary quinone**  
**acceptors; PQ,**  
**plastoquinone;  $PQH_2$ ,  
**plastoquinol;**  
 **$H_L^+$  and  $H_S^+$  protons in**  
**lumen and stroma,****





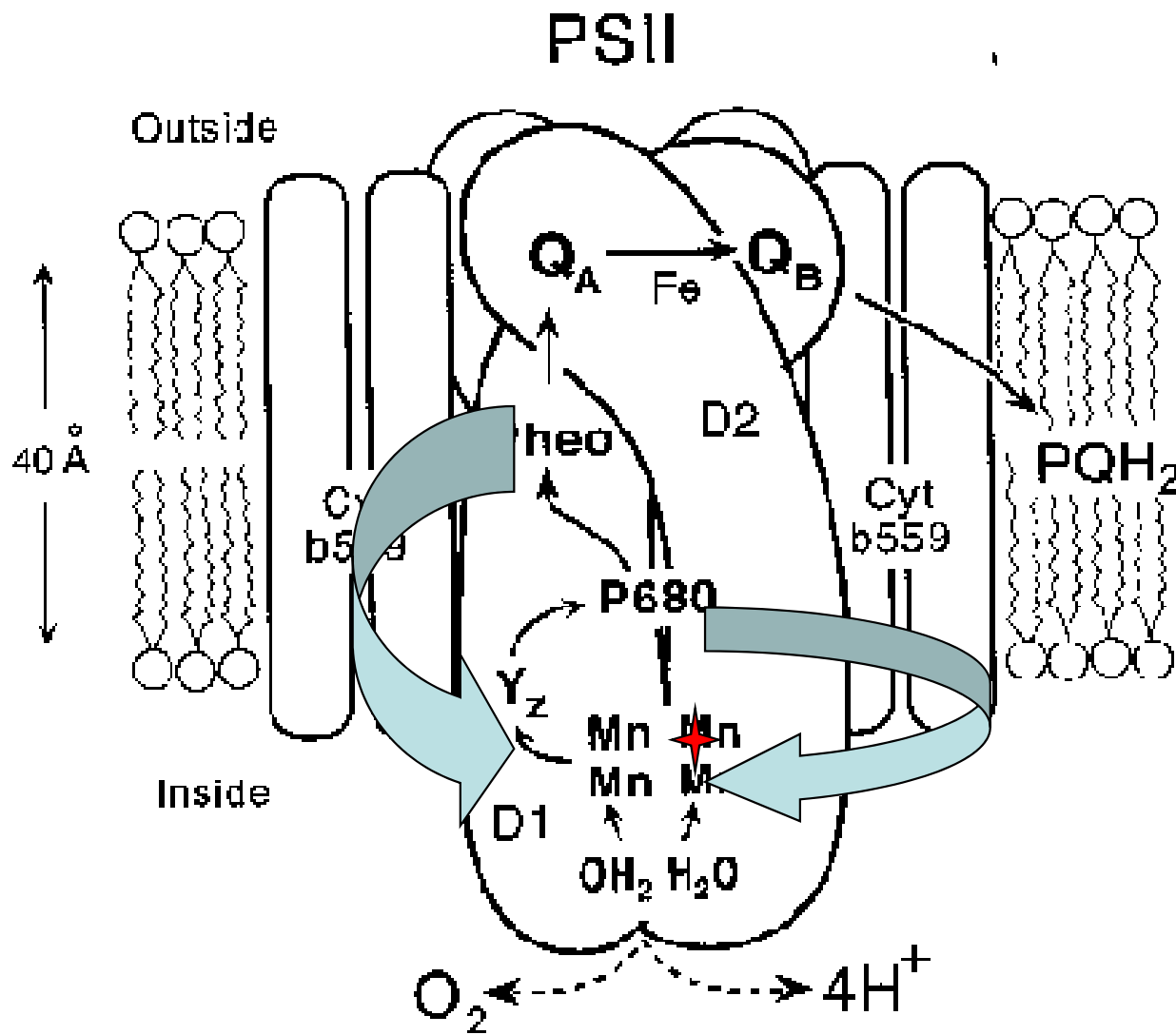
Experiment (dots, lab. Prof. G.Renger, Berlin) and simulation (solid lines). Fluorescence induction curves after the saturating 10 ns laser flash (different intensities), cells of thermophilic *Chlorella pyrenoidosa* Chick.



Scheme of experiment

Beljaeva, Renger et al.,  
2011, 2014, 2015  
Photosyn. Res.



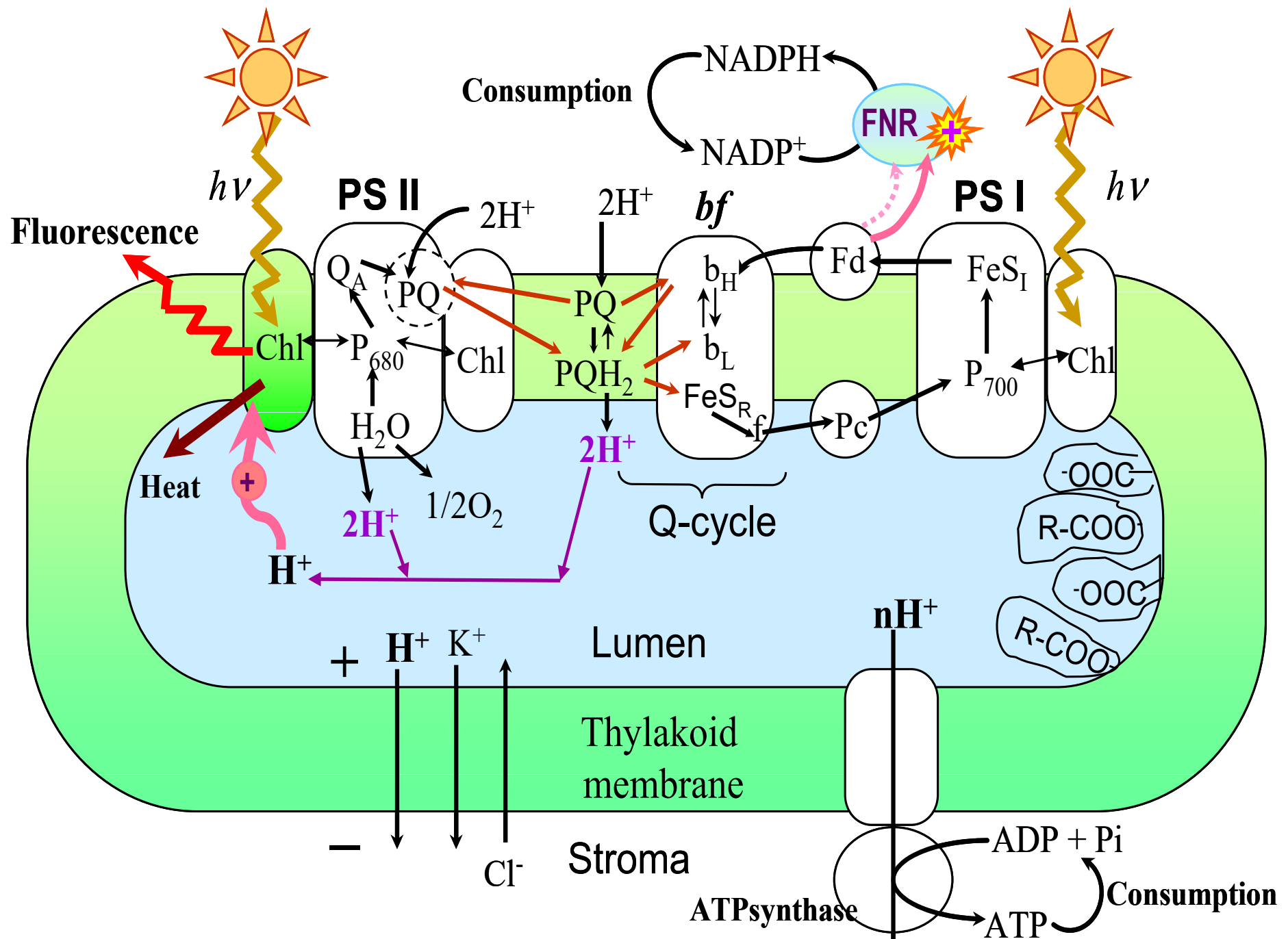


## Процессы безызлучательной релаксации

В зависимости от  
интенсивности света  
потери в тепла могут  
составлять  
от 3 до 30 %

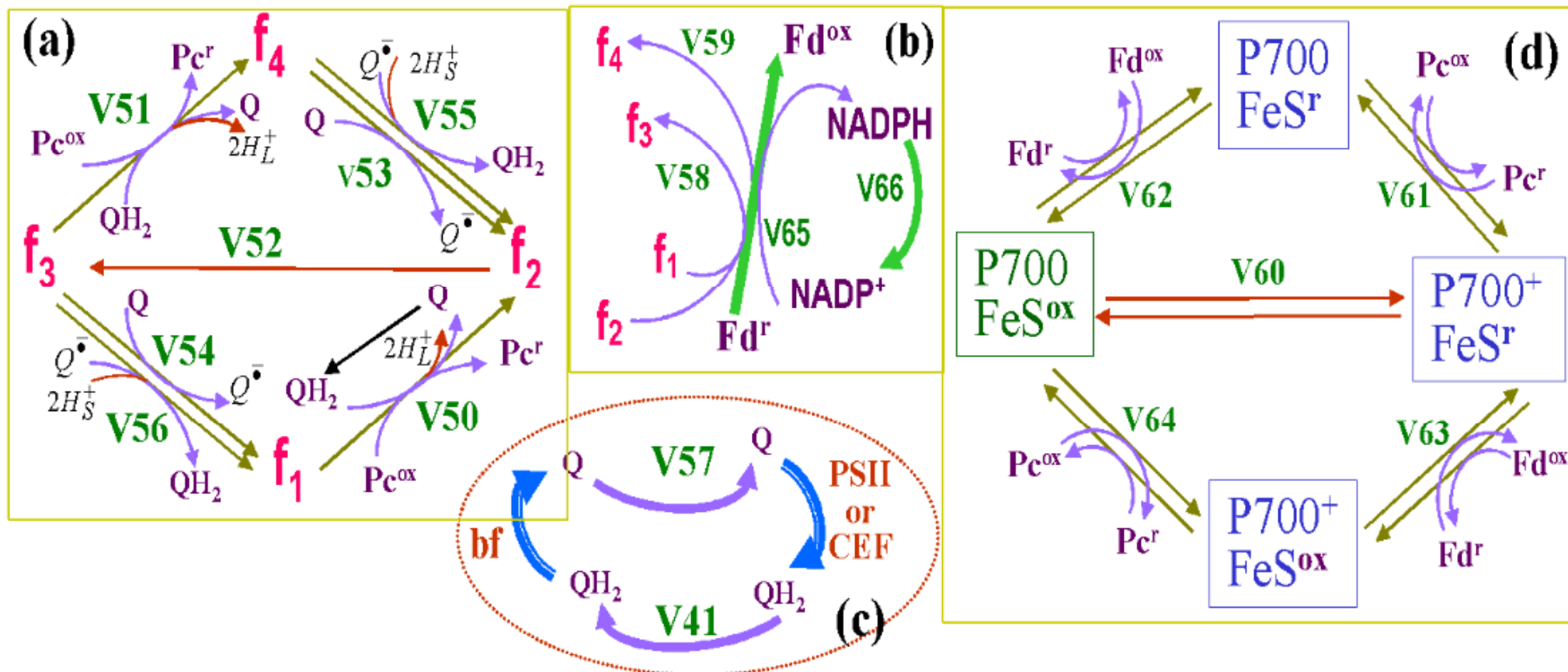
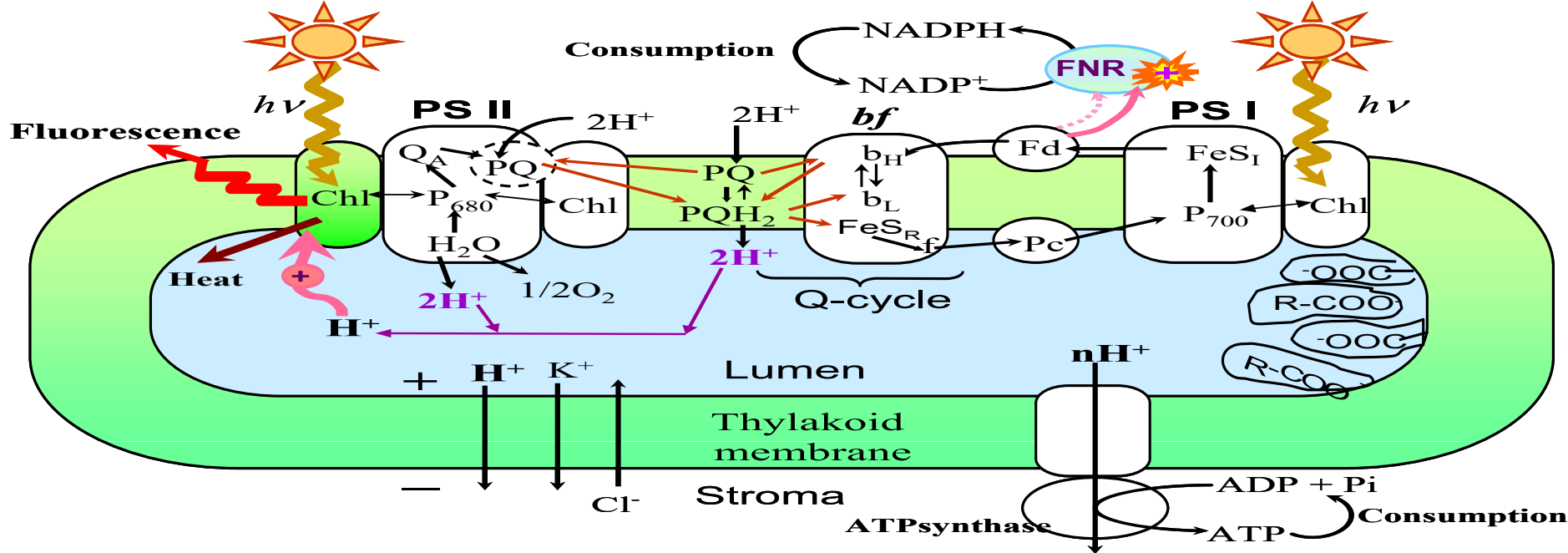
(2008) PSII model-based simulations of single turnover flash-induced transients of fluorescence yield monitored within the time domain of 100ns-10 s on dark-adapted *Chlorella pyrenoidosa* cells. *Photosyn Res* 98:105-119.

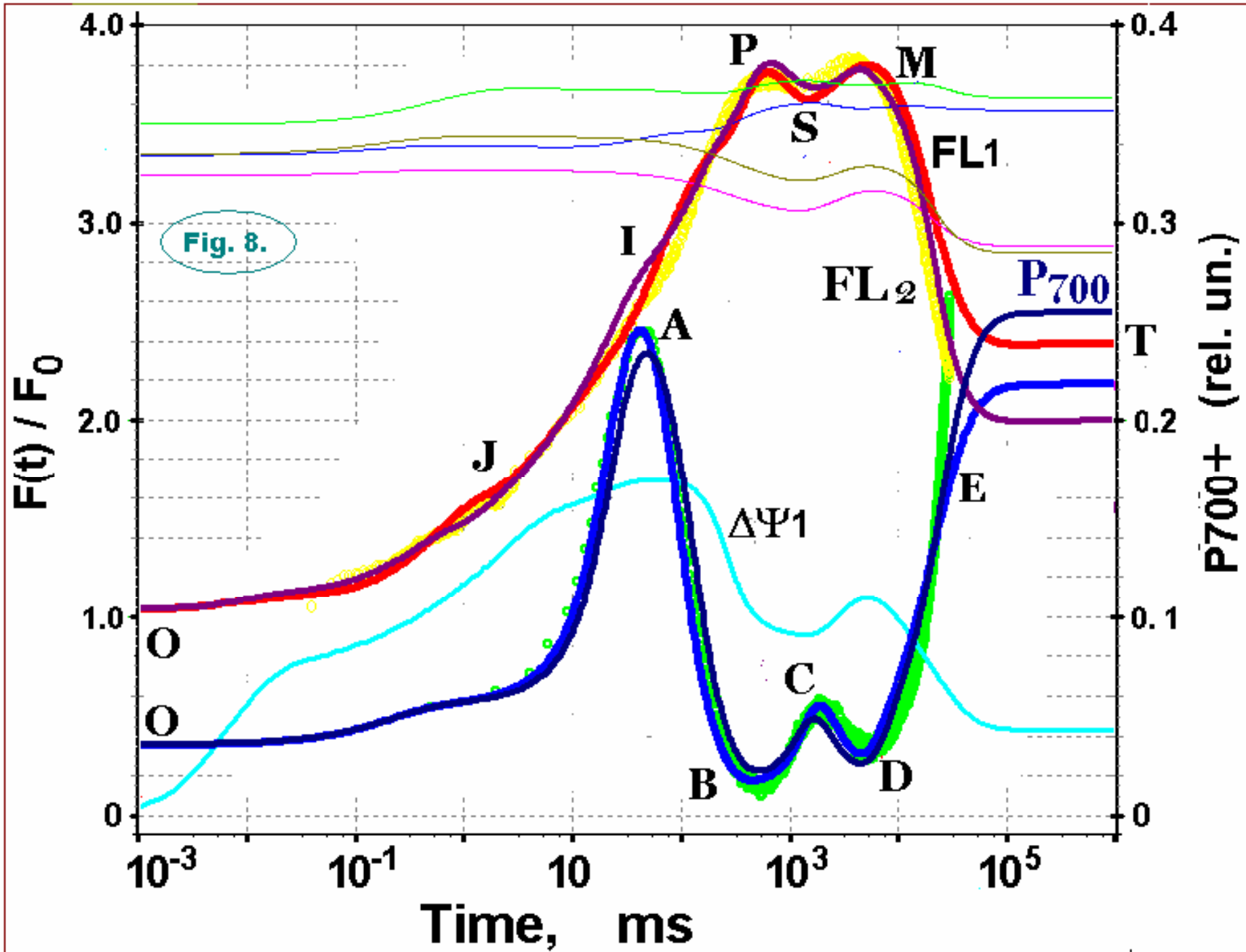
(2011) PS II model based analysis of transient fluorescence yield measured on whole leaves of *Arabidopsis thaliana* after excitation with light flashes of different energies. *BioSystems* 103(2):188-195



Belyaeva, Bulychov, Riznichenko, Rubin, 2016; 2019, 2021 Photosyn. Research. Биофизика, 2022







Экспериментальные и модельные кривые индукции флуоресценции и редокс превращений P700 – фотоактивного пигмента Фотосистемы I на временах до 30 сек. Belyaeva, Bulychov, Riznichenko, Rubin 2016, 2019, Phot. Res.



# Биофотореакторы

Получение целевых продуктов

Стресс – голодание по сере, по магнию

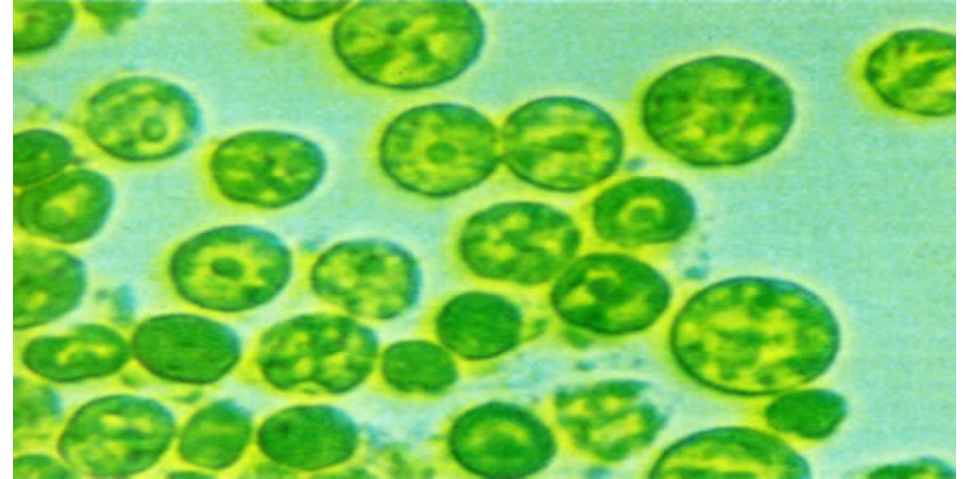
– молекулярный водород

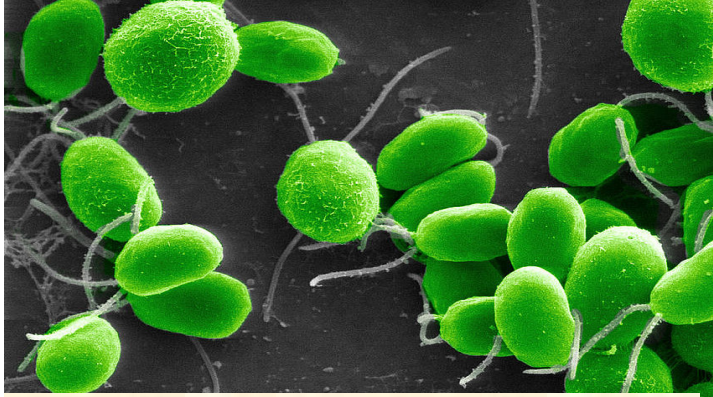
фосфорное голодание – биомасса, обогащенная фосфором

Автоматический контроль за состоянием культуры

Плюснина Т.Ю., Хрущев С.С. – обработка данных

Antal T, Konyukhov I, Volgusheva A, Plyusnina T, Khruschev S, Kukarskikh G, Goryachev S, Rubin A (2018) Chlorophyll fluorescence induction and relaxation system for the continuous monitoring of photosynthetic capacity in photobioreactors. *Physiol Plantarum*, DOI : 10.1111/ppl.12693



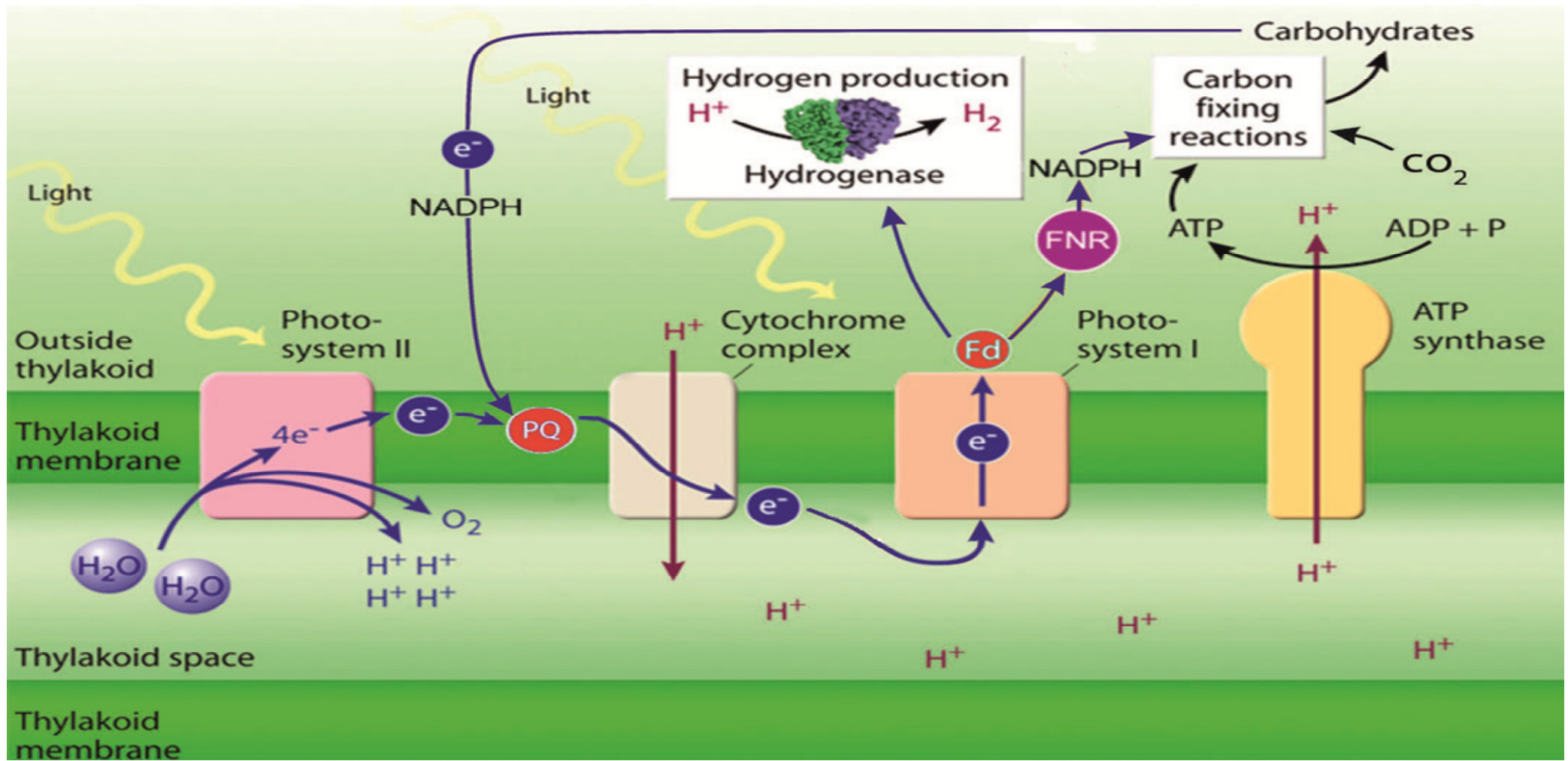


*Chlamydomonas reinhardtii* cells

## Модели фотосинтетического электронного транспорта водород-выделяющих водорослей

Плюснина и др., 2013; Diakonova et al., 2016;  
Riznihenko et al., 2017

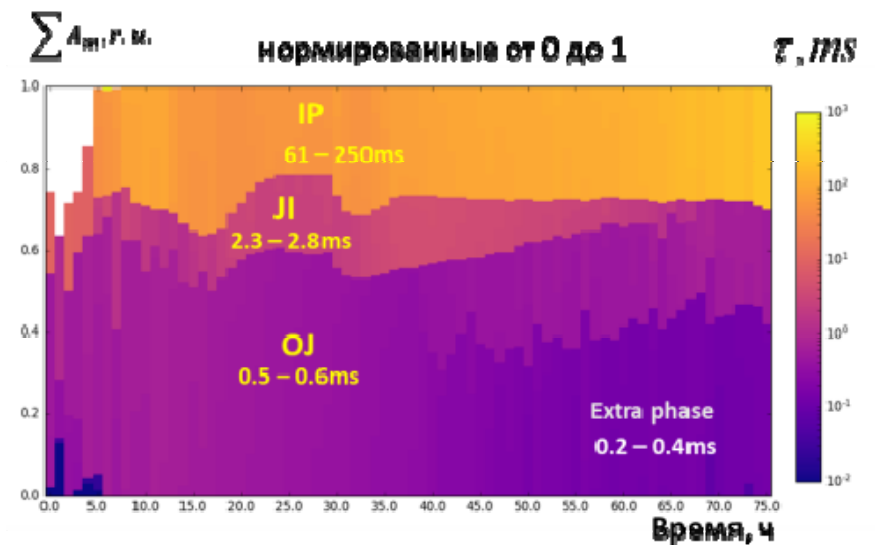
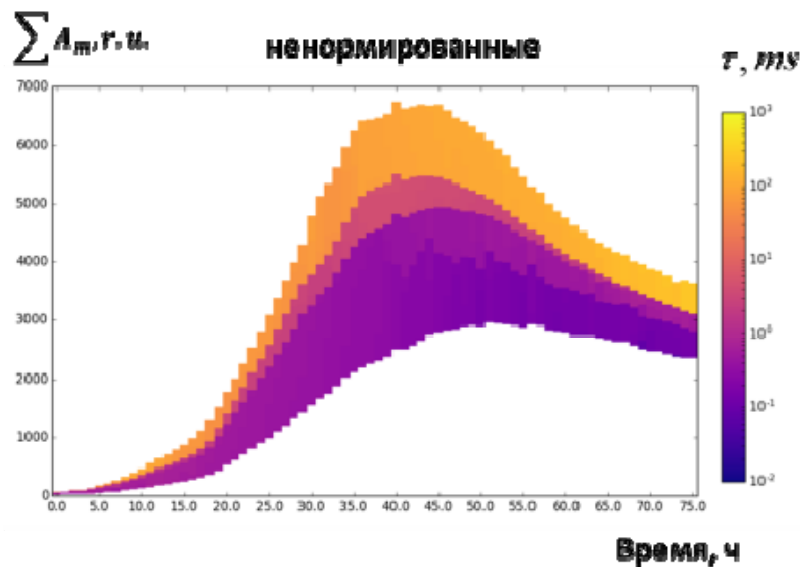
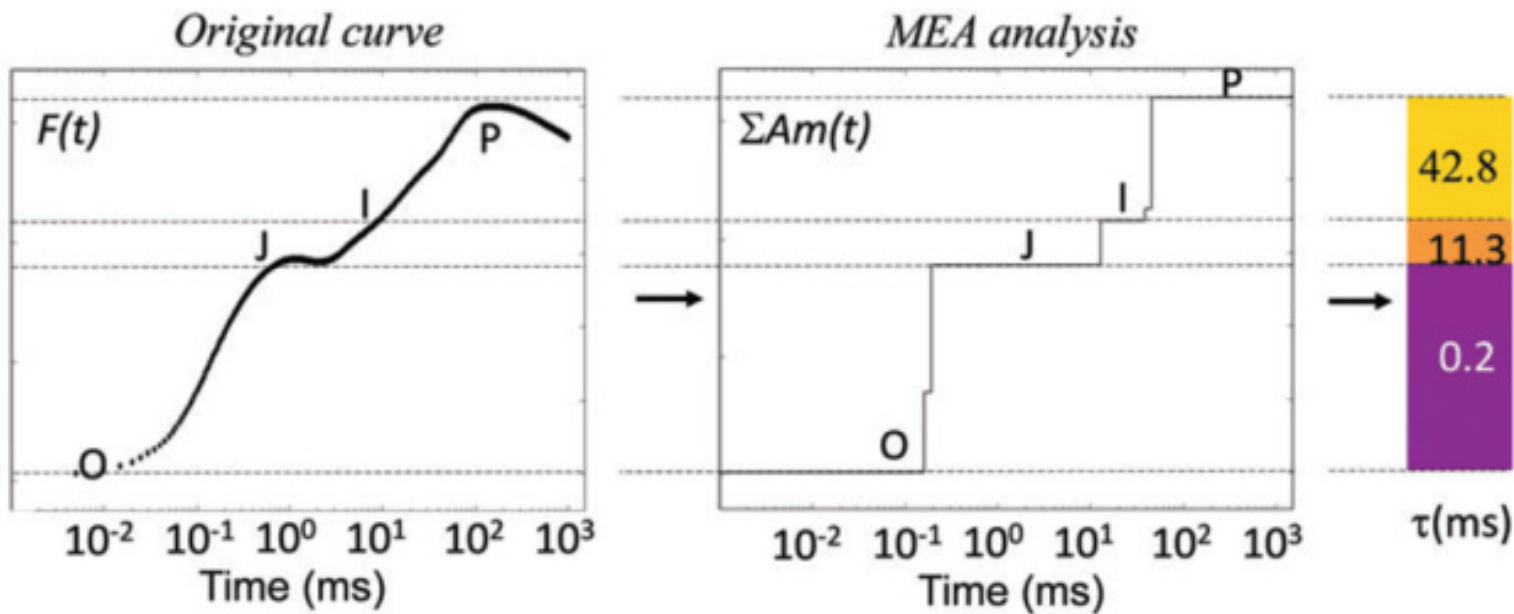
### Photosynthetic electron transport chain







# Спектральный мультиэкспоненциальный анализ



В качестве «агентов» могут вступать:

отдельные электрон-транспортные цепи в Монте Карло моделях

Макромолекулы – подвижные переносчики электронов и мультиферментные комплексы - в броуновских многочастичных моделях

Отдельные атомы – в моделях молекулярной динамики

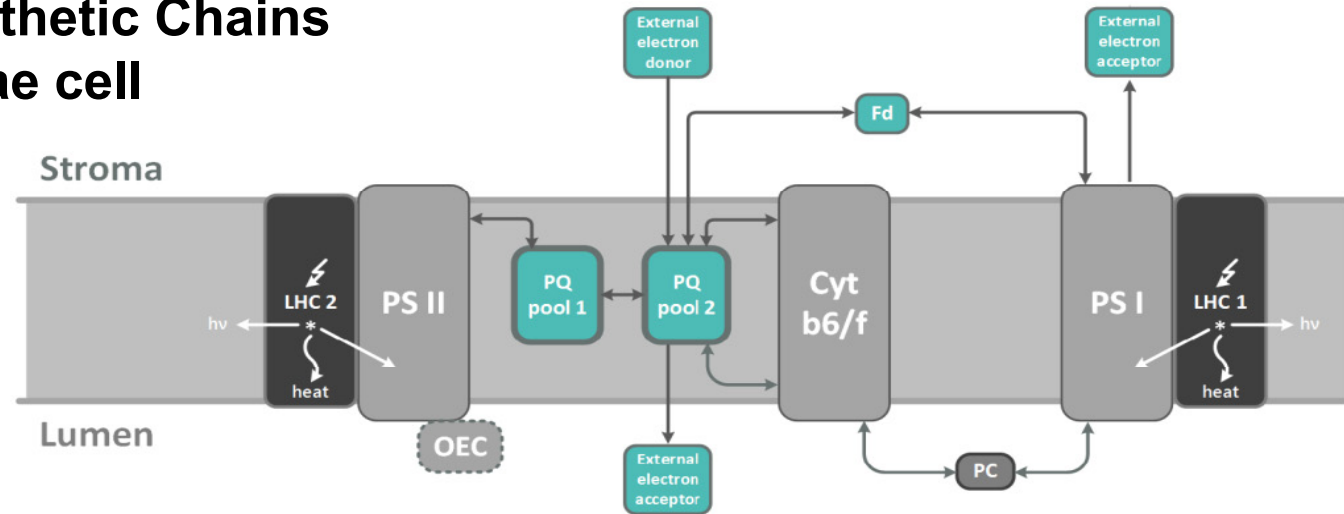
Группы атомов – при крупнозернистом (course-grain) моделировании

# **АГЕНТНЫЕ МОДЕЛИ**

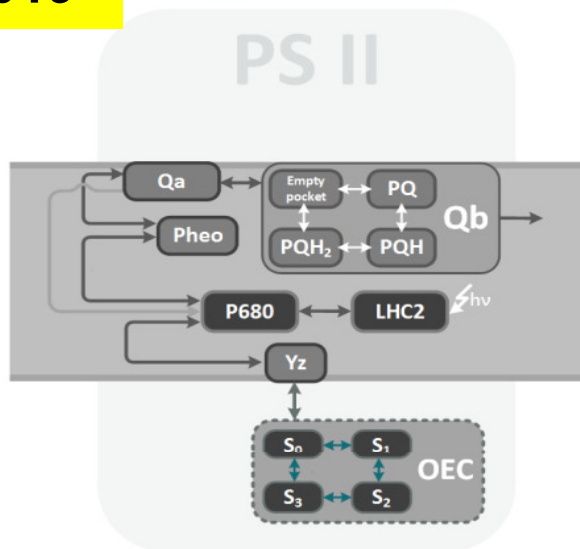
# Agent-based kinetic Monte Carlo models

3 millions of Photosynthetic Chains<sup>A</sup>  
As in a real micro algae cell

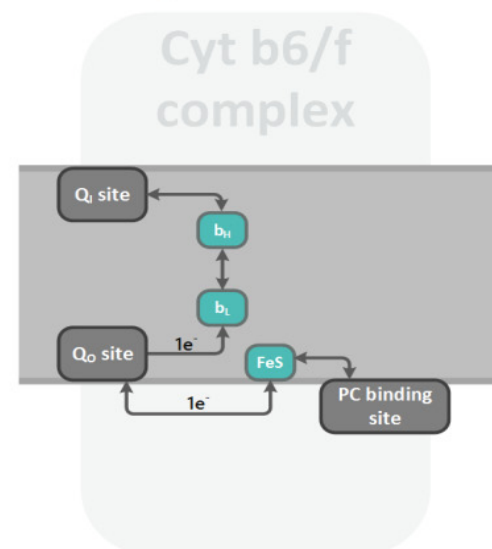
Маслаков и др.,  
Биофизика.  
2016,  
Antal et al.,  
Phot. Res. 2019



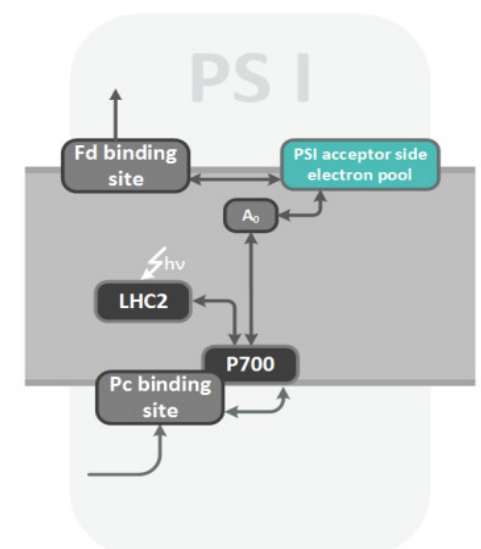
B



C



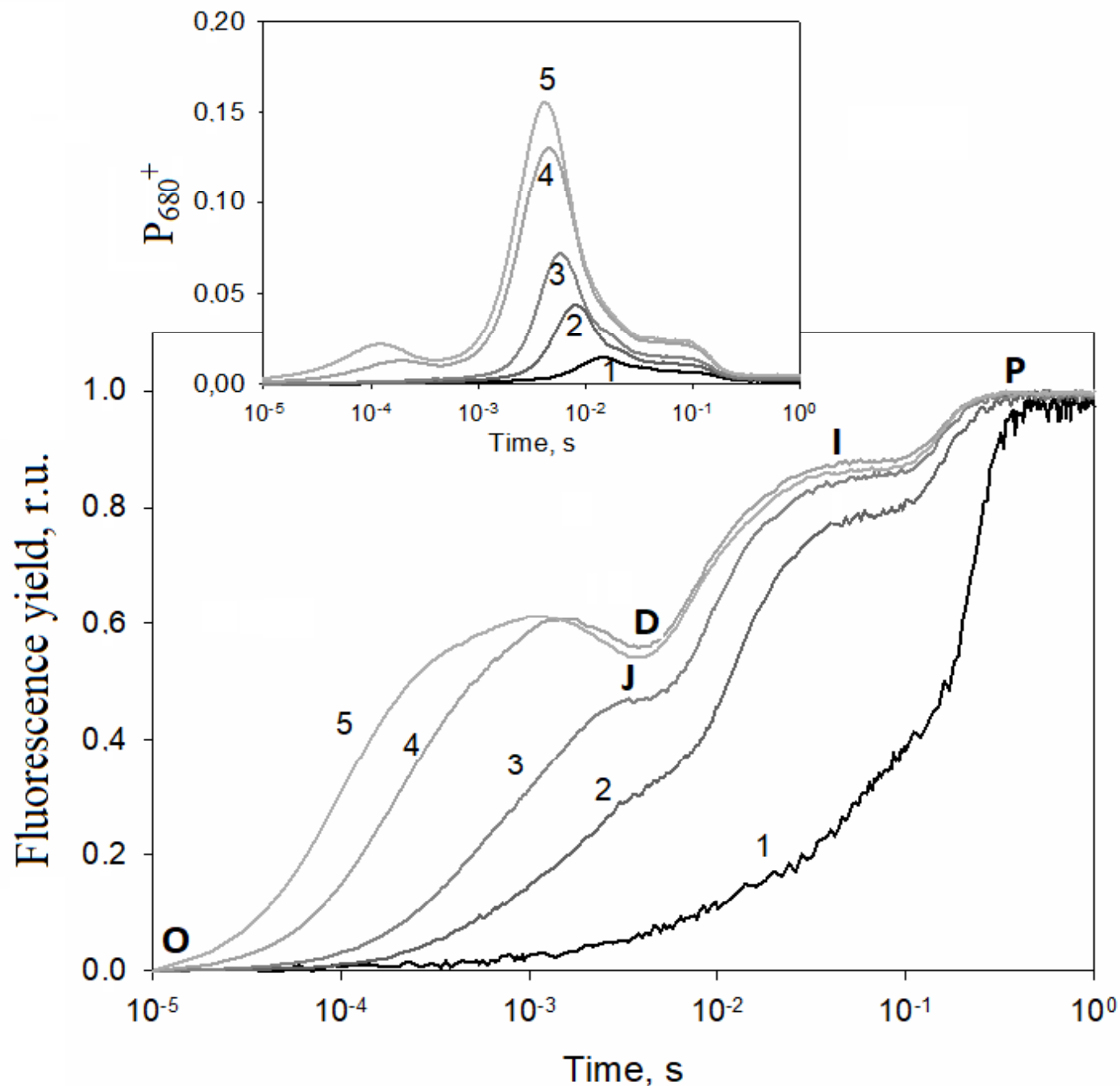
D

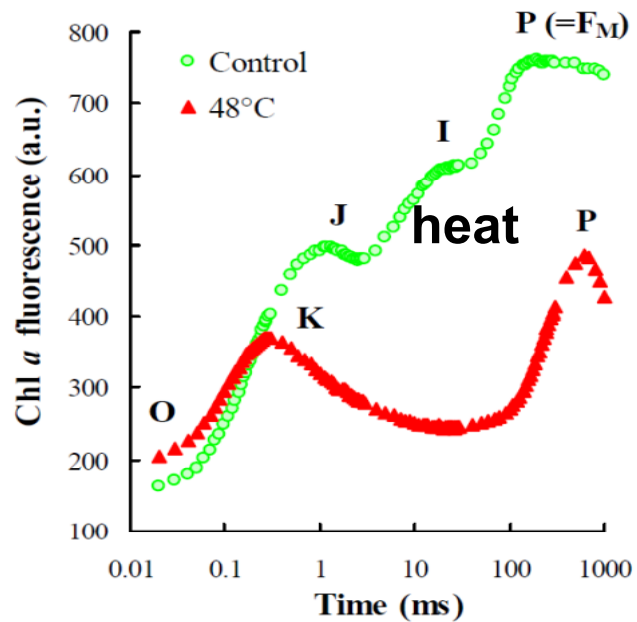
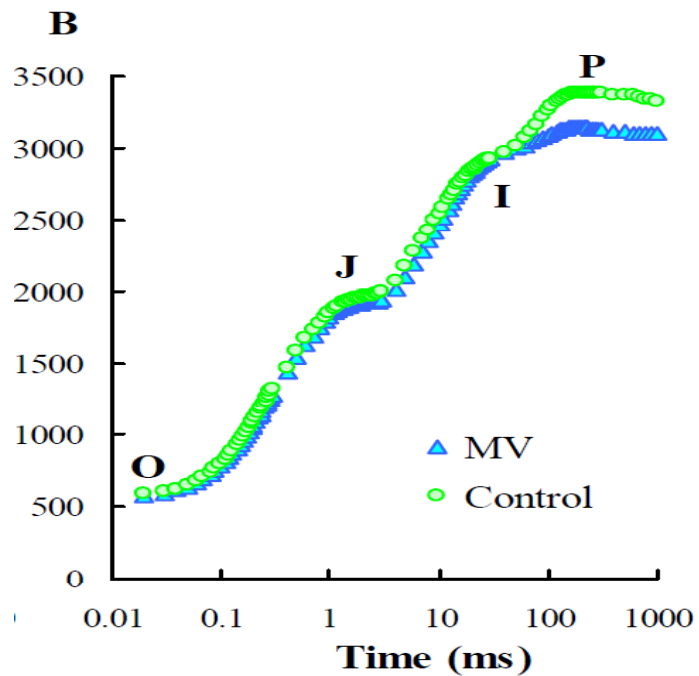
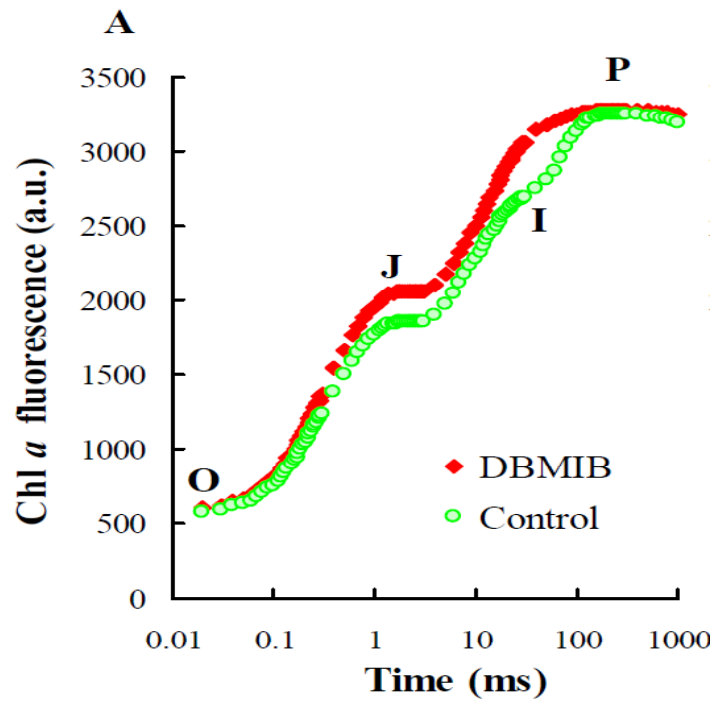
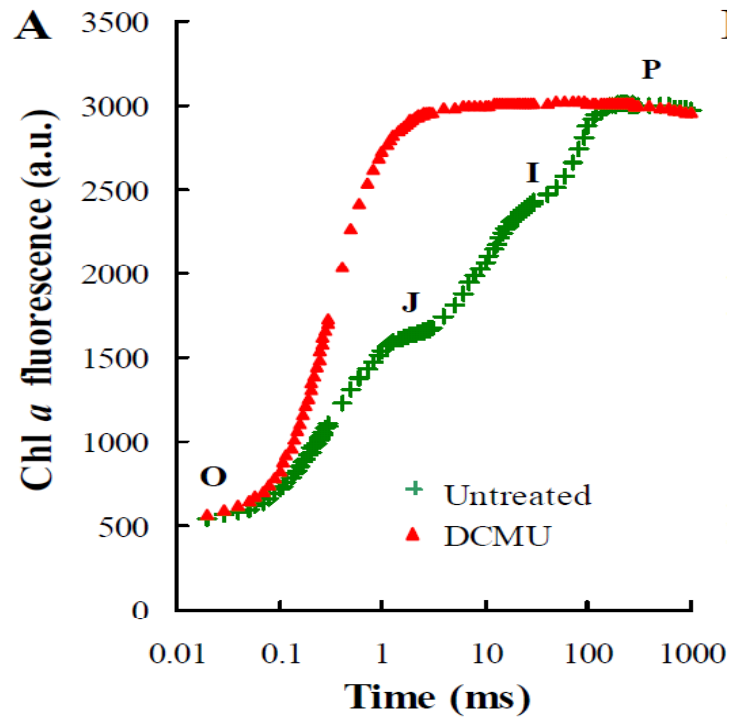




**Simulated  
fluorescence  
transients under  
different  
intensity of  
actinic light: 120,  
1000, 2000, 6000,  
and 12000 photons  $m^{-2} s^{-1}$   
(curves 1, 2, 3, 4  
and 5,  
respectively).**

**Inset shows the  
corresponding  
light-induced  
redox transitions  
of  $P_{680}^+$**

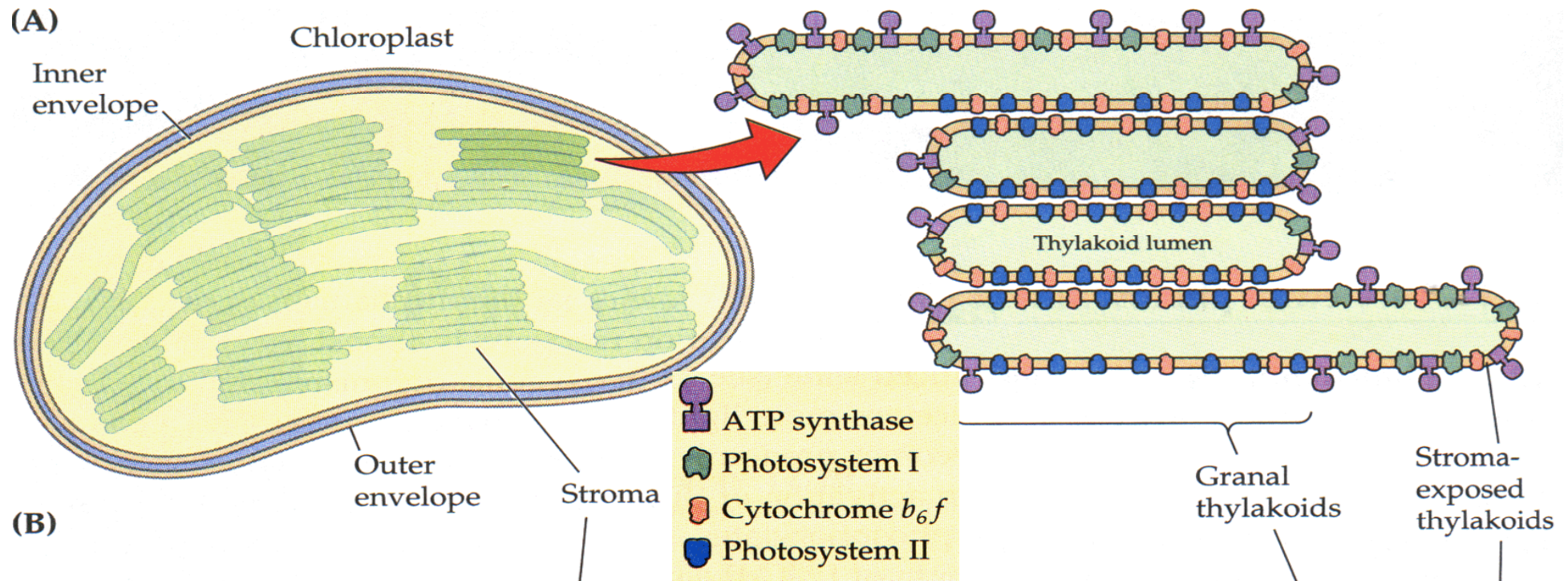




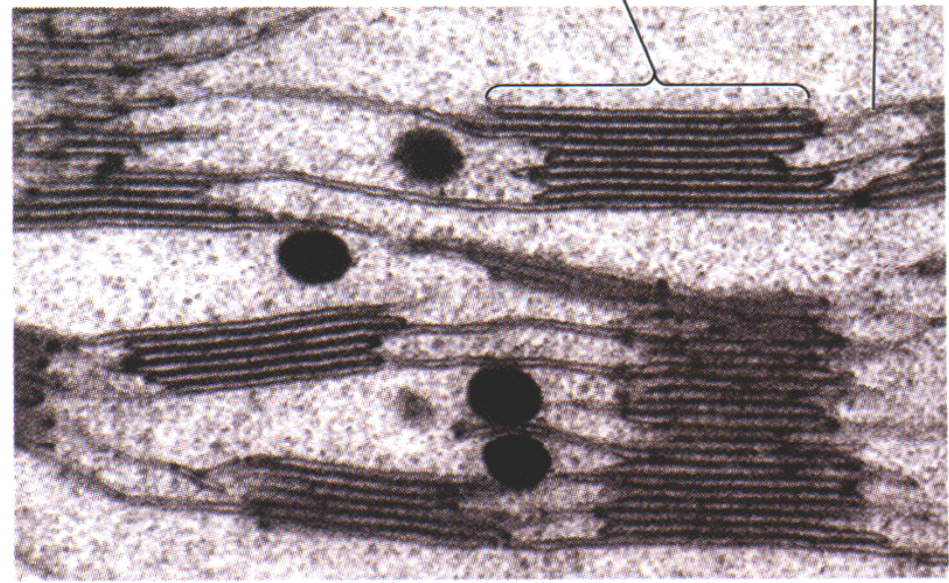
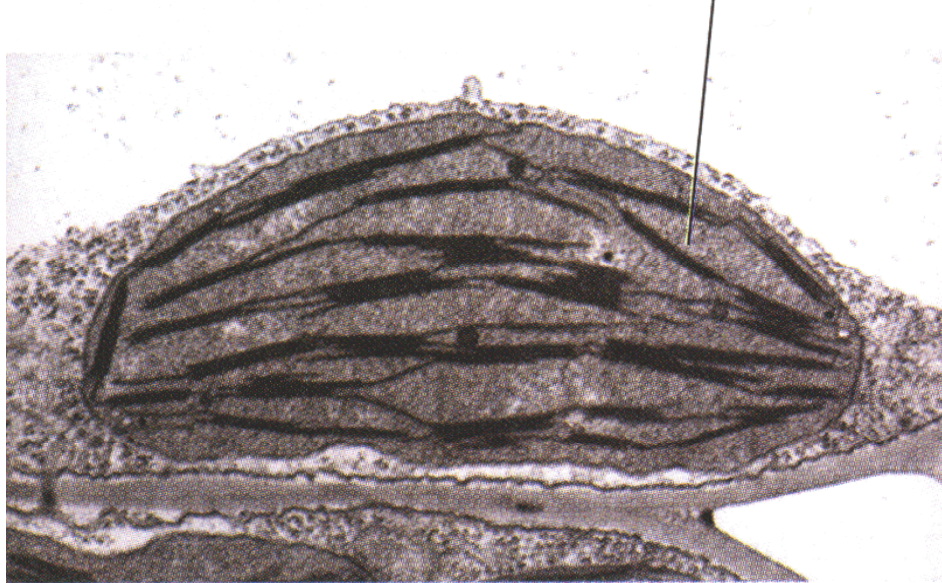
Simulation  
of inhibitor  
actions



# Chloroplast. Space heterogeneity

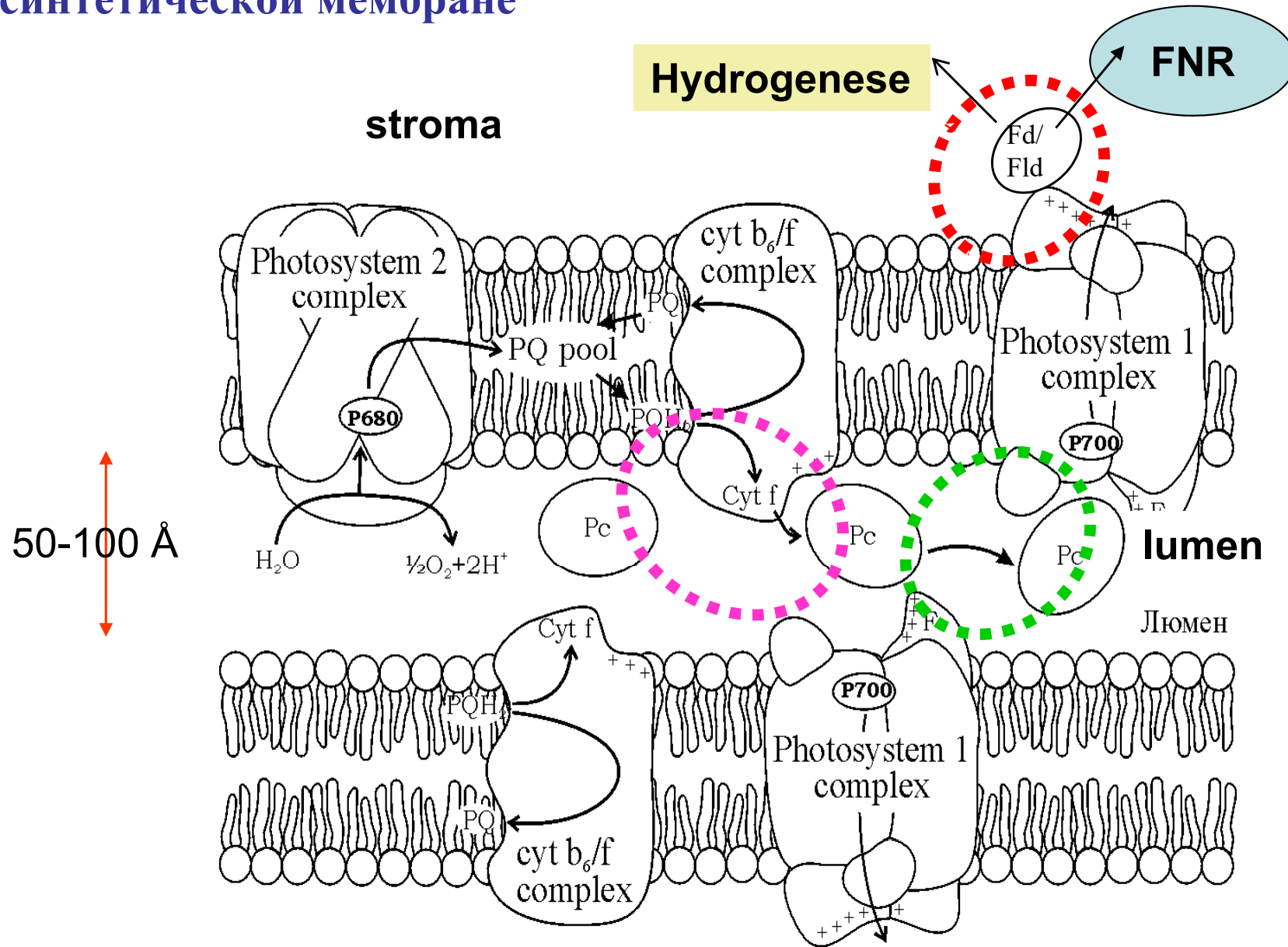


(B)





# Мультиферментные комплексы и подвижные переносчики в фотосинтетической мембране



Фрагмент фотосинтетической мембраны



# Белок- белковые взаимодей- ствия

Kovalenko et al., 2006 -2015,  
2017, 2019

Хрущев и др., 2014, 2015

Abaturva et al., 2009;

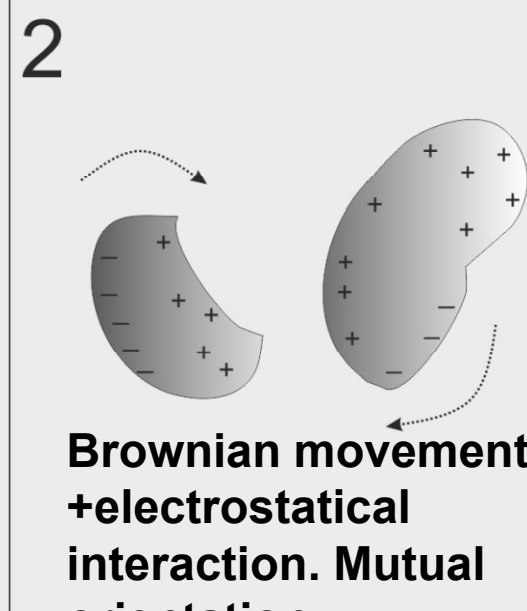
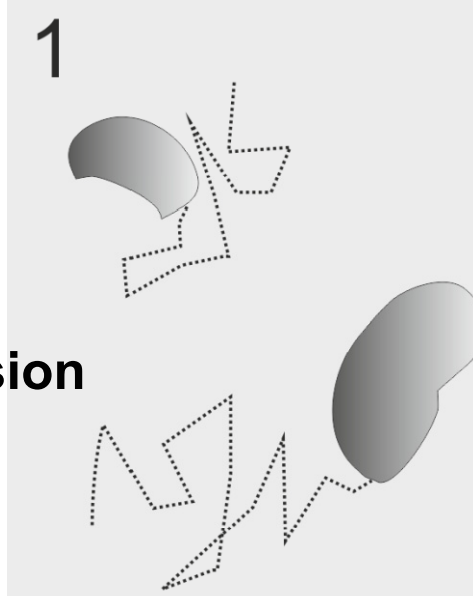
Dyakonova et al., 2009,2016

Князева и др., 2011,

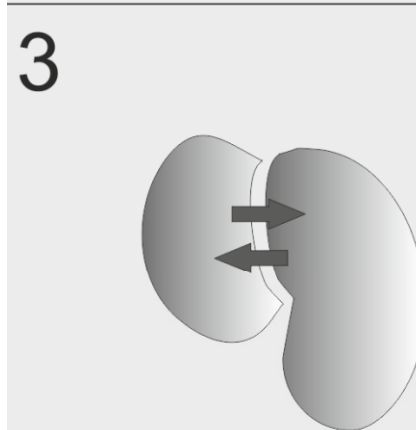
Riznichenko et al., 2009,

2010, 2011, 2017, 2022

diffusion



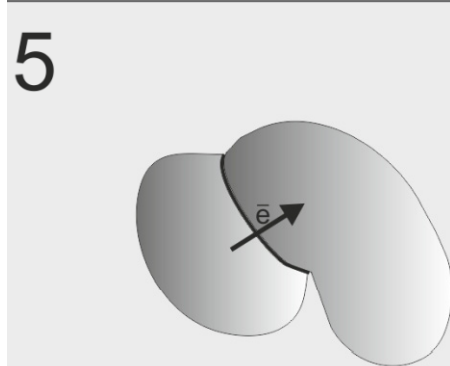
Preliminary complex



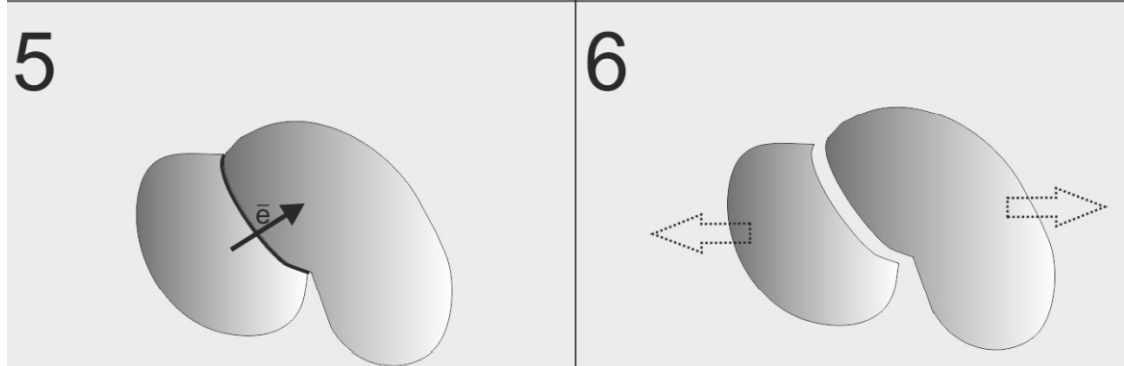
Conformation changes.  
Final complex



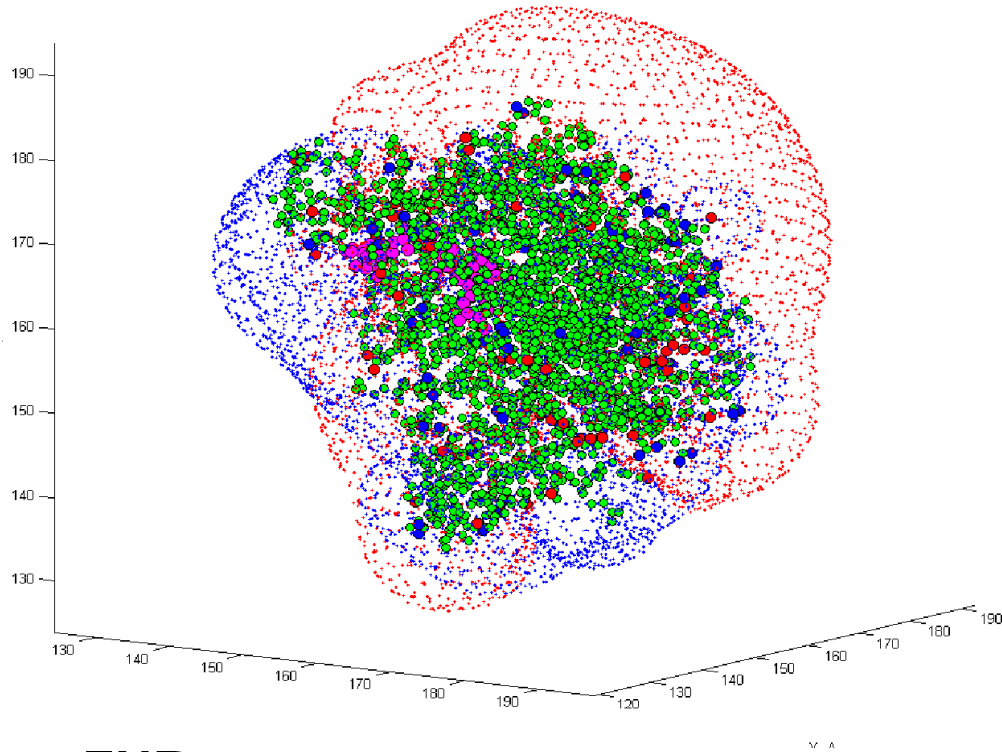
Reaction. Charge exchange



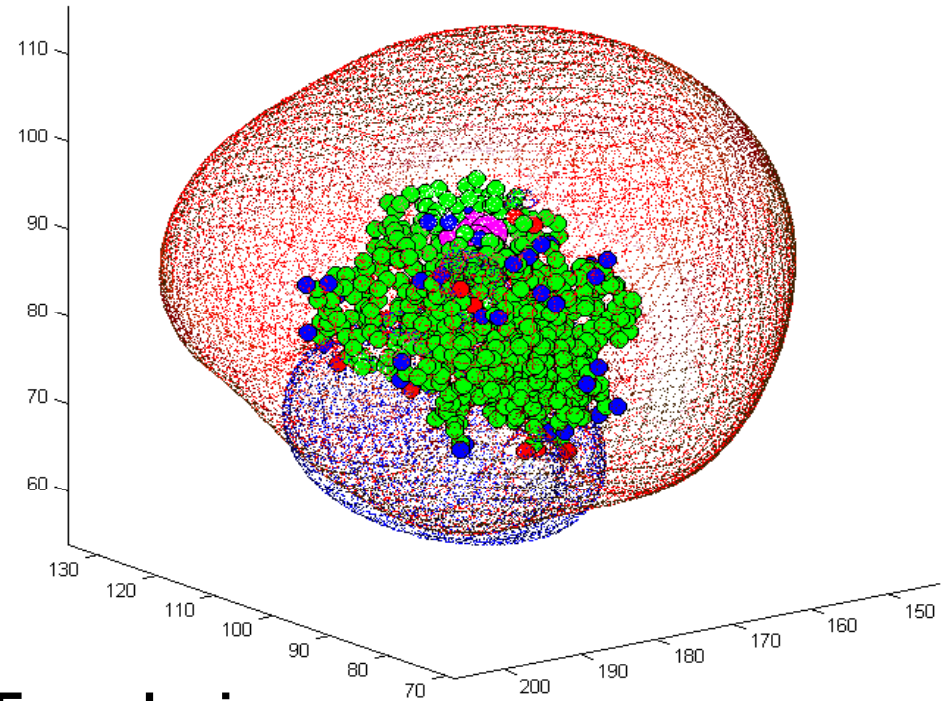
Complex dissociation



# Equipotential surfaces of FNR (PDB: 1QUE) and reduced Fd (PDB: 1FRD) from *Anabaena* 7120



**FNR**

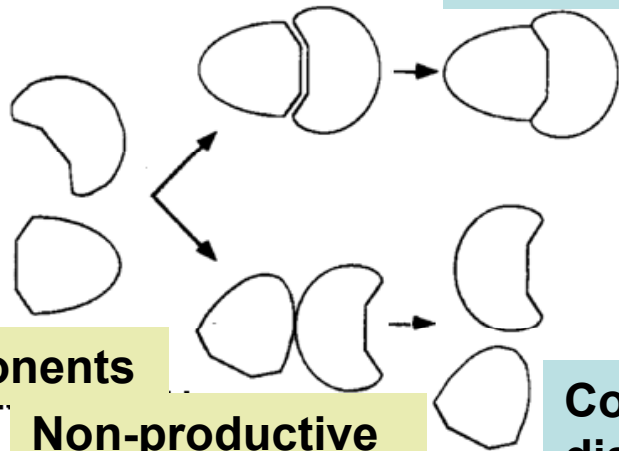


**Ferredoxin**

*Ion strength - 100 mM, pH=7,  $\epsilon$  (sol)80;  $\epsilon$ (prot) =2; red -6.5 mV, blue + 6.5 mV; green – non-charged atoms; red– negatively charged atoms; blue – positively charged atoms, pink – FAD in FNR and [2Fe-2S] cluster in Fd*

Preliminary complex

Final Complex → reaction



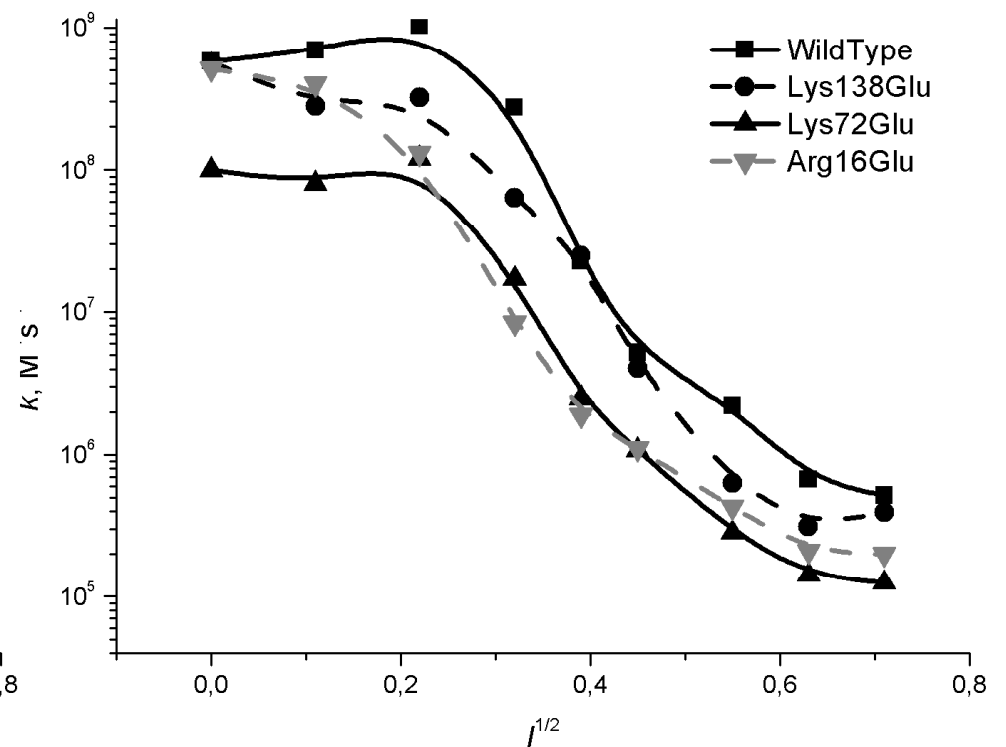
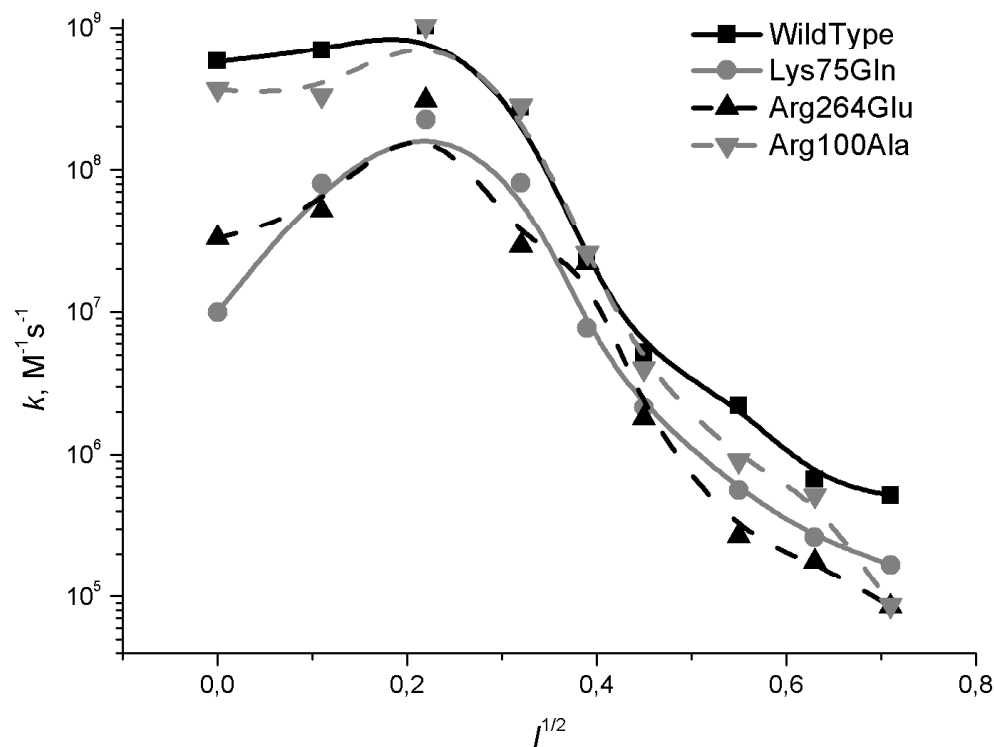
components

Non-productive complex

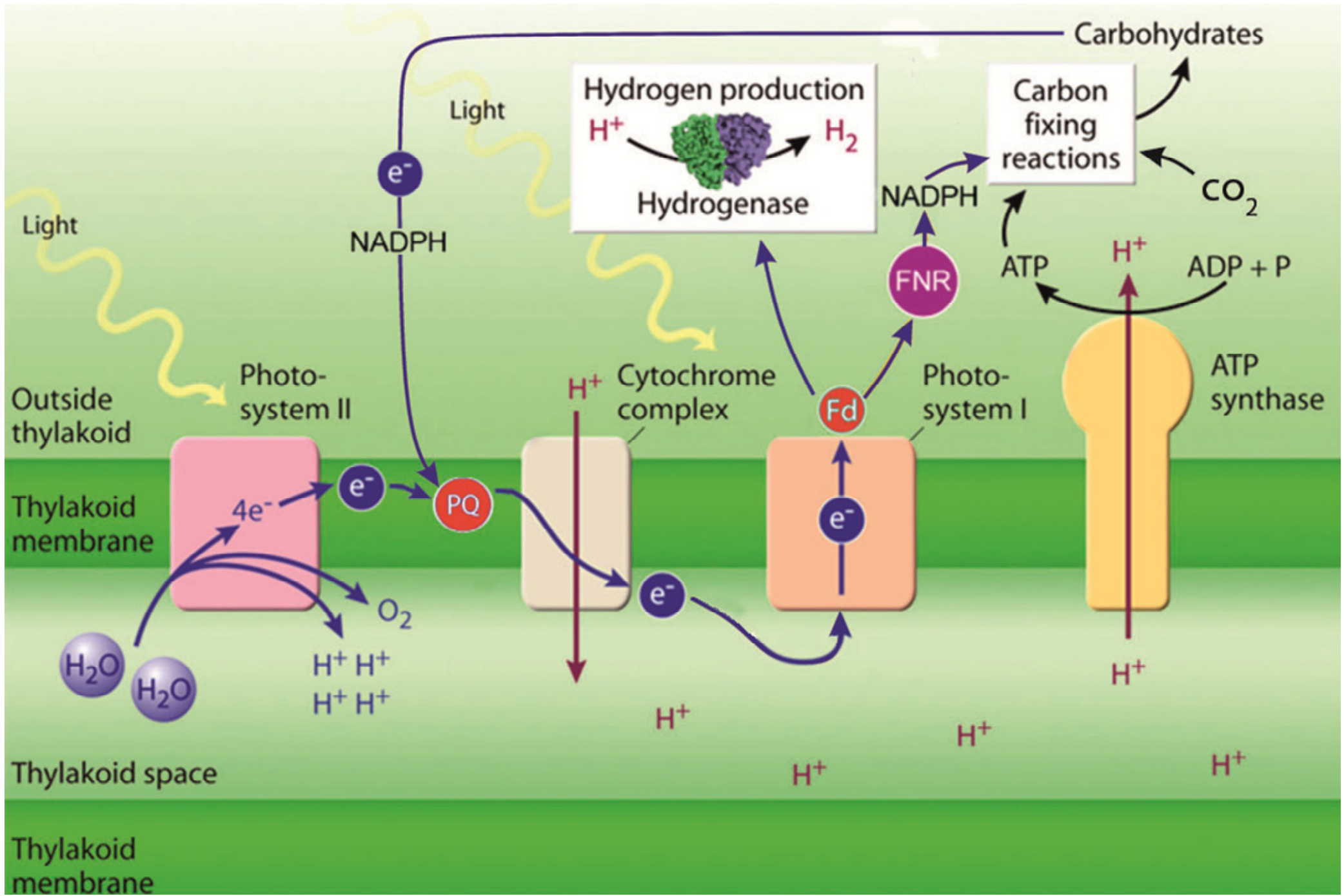
Complex dissociation

Non-monotonous dependence of the Rate constant of complex interaction on the ion strength

**Fd-FNR interaction**



# Пути переноса электрона в условиях стресса'





Hydrogenase

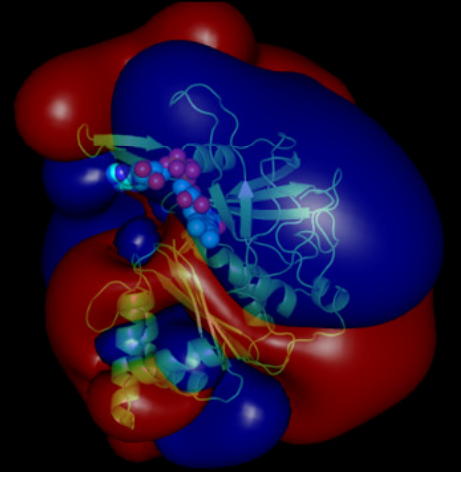
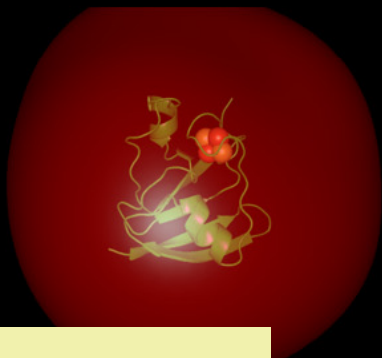
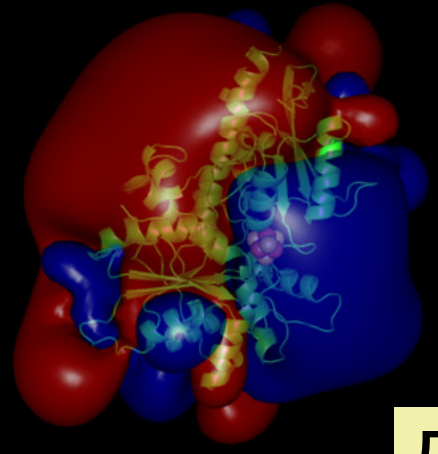
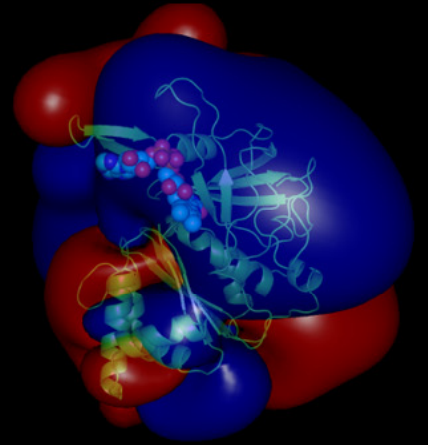
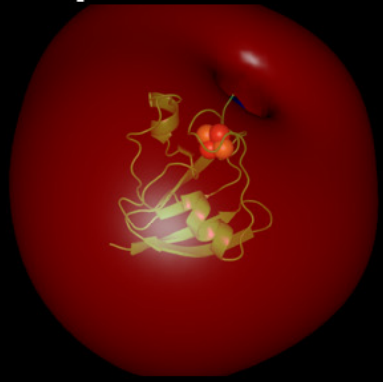
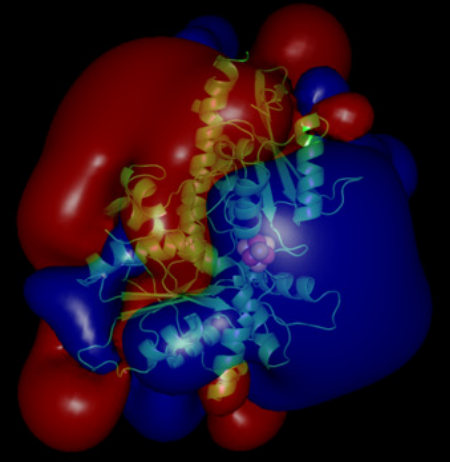
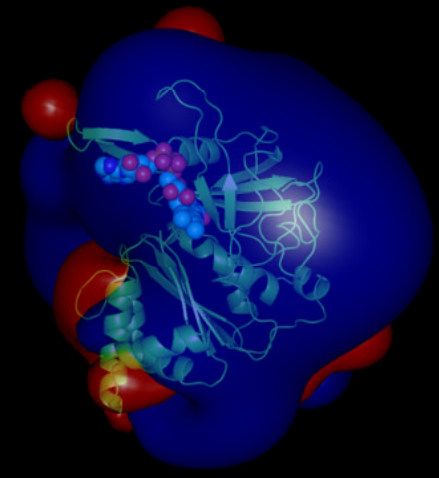
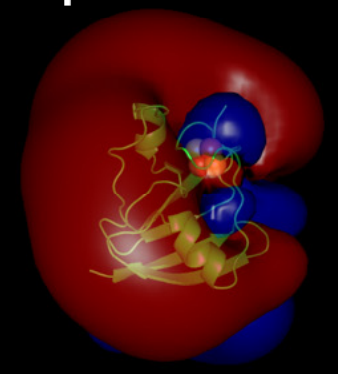
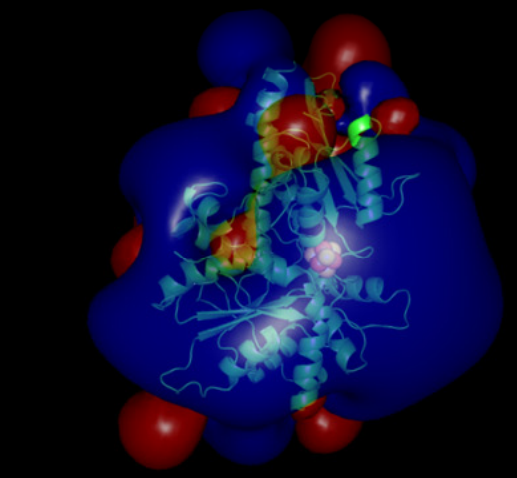
Ferredoxin

FNR

pH = 5

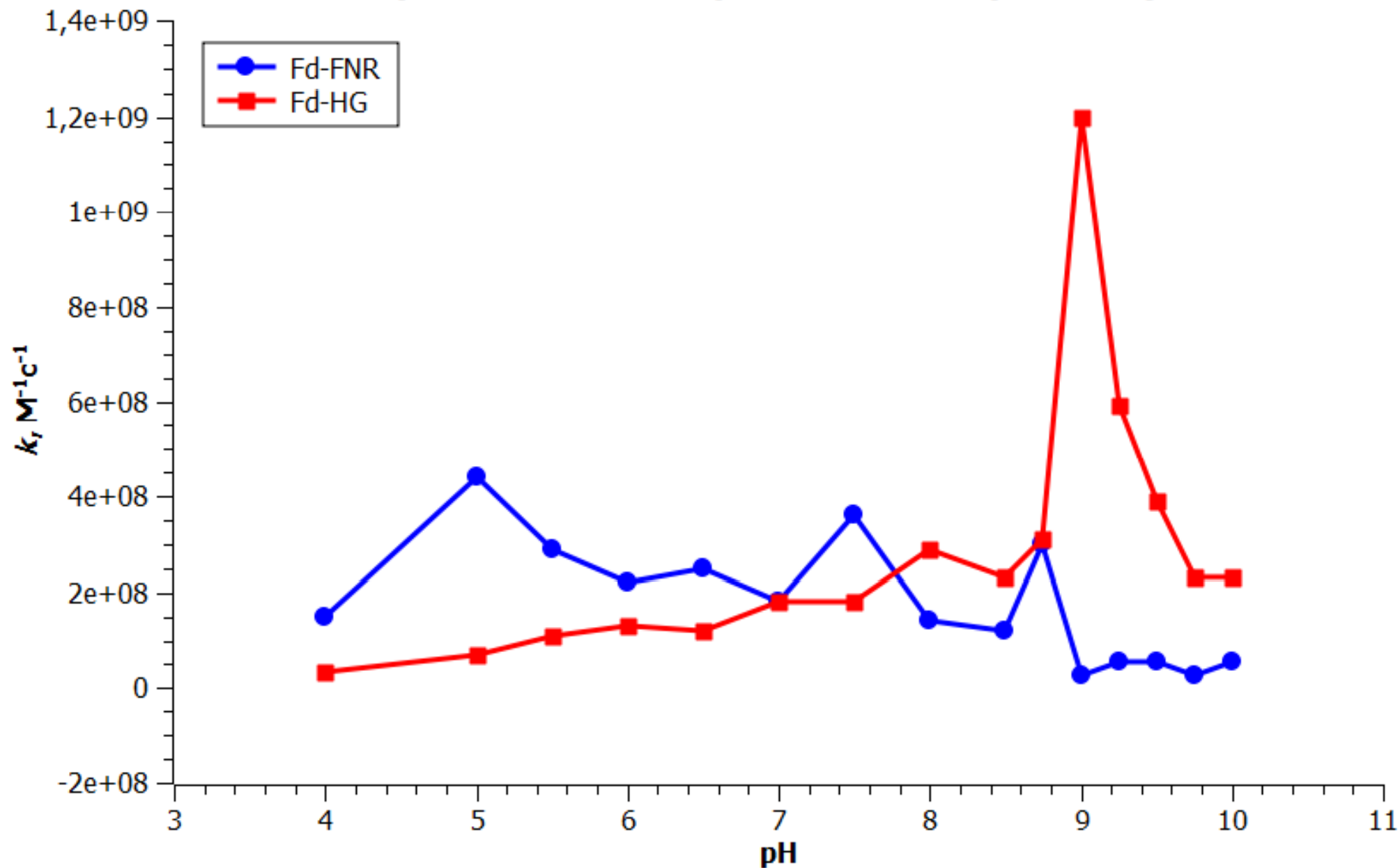
pH = 7

pH = 9

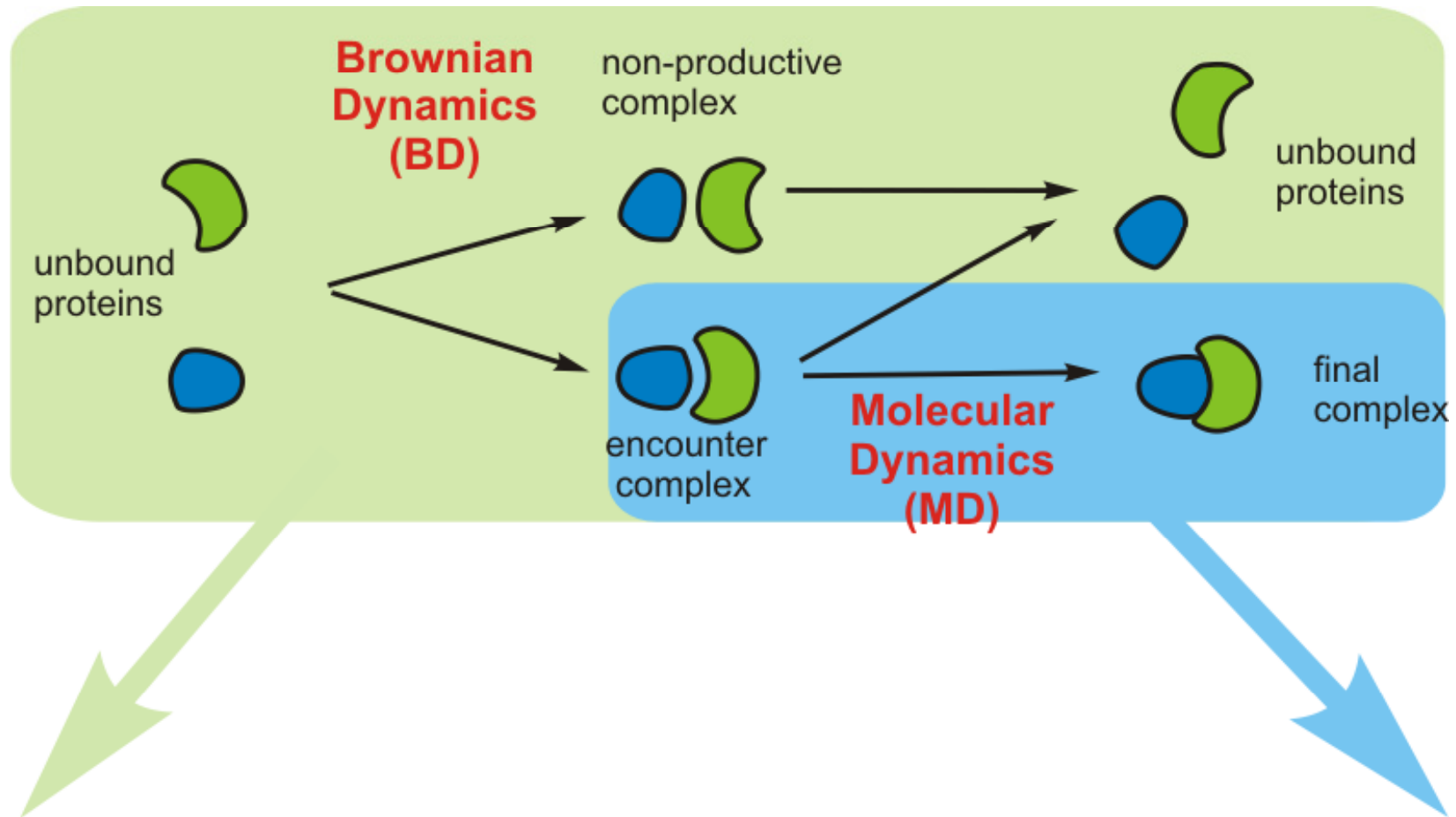


Дьяконова и др. в печати

## Dependence of the rate constant of Fd-FNR and Fd-HG complex formation on pH in the three-protein system



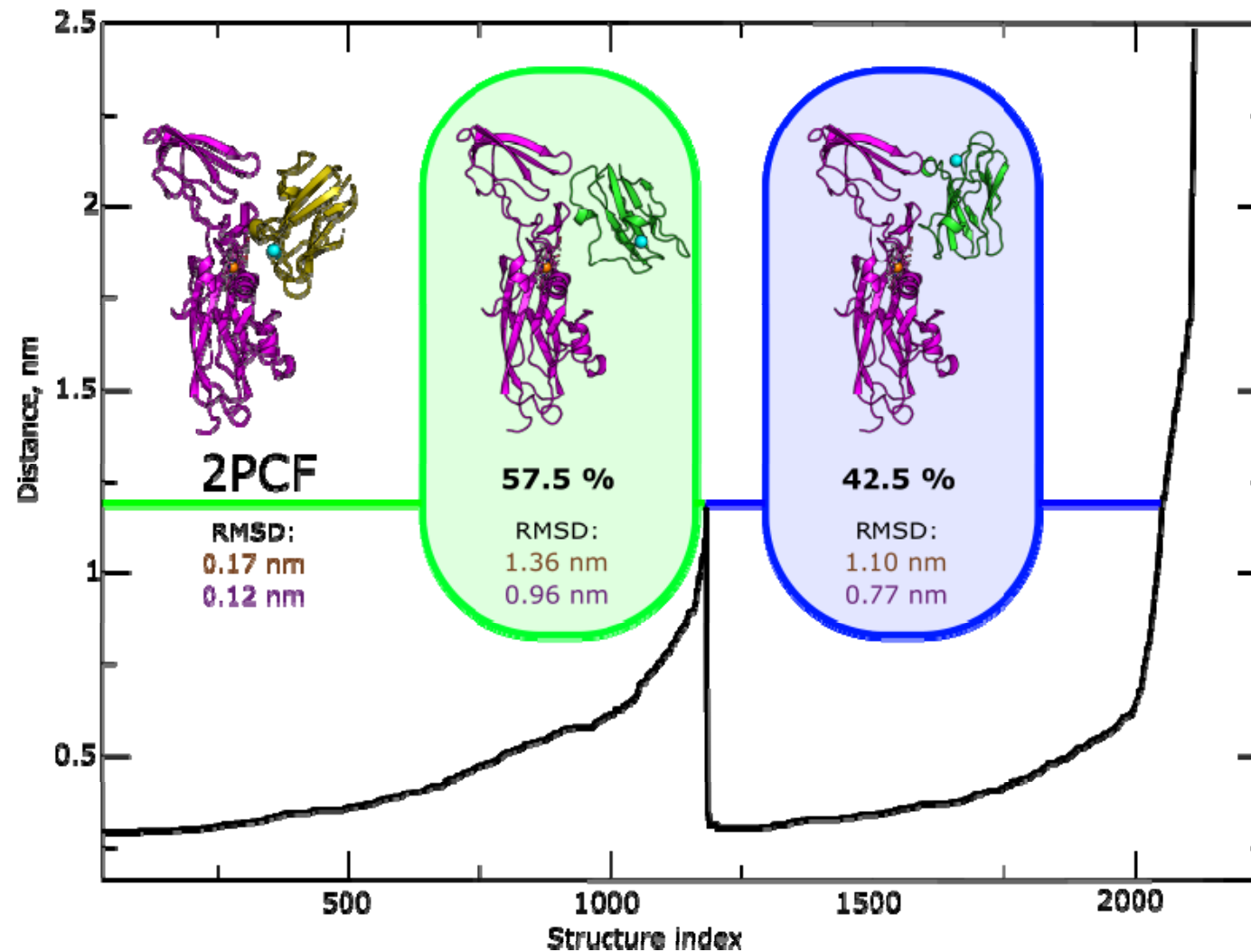
# Protein-protein complex formation



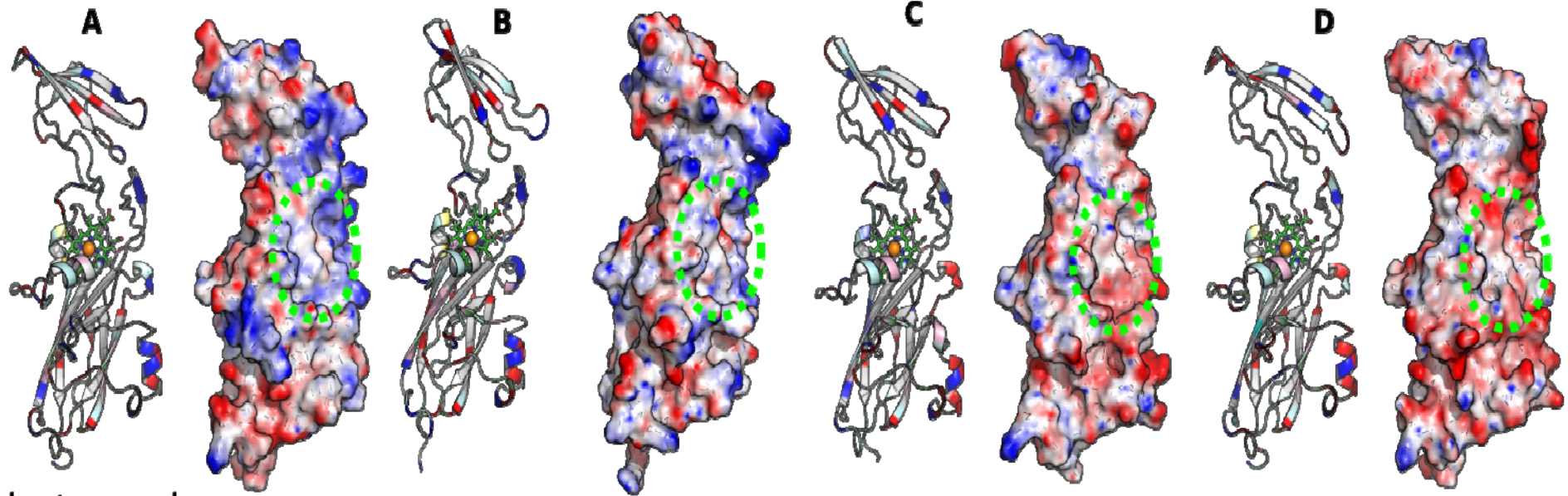
**Encounter complex  
simulation by  
Brownian Dynamics**

**Final complex simulation by  
Molecular Dynamics**

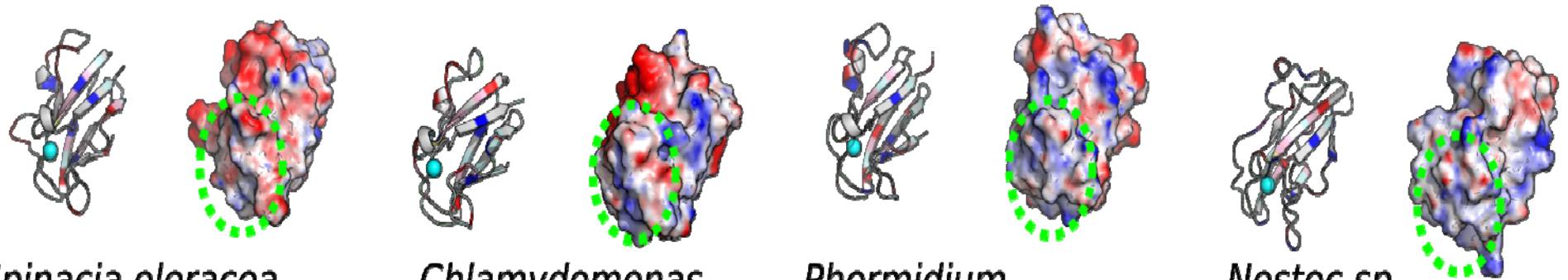
# Продуктивный и непродуктивный комплексы



cytochrome f



plastocyanin



*Spinacia oleracea*  
*Brassica rapa*

Total charge:  
plastocyanin: -8 e.c.  
cytochrome f: -4 e.c.

*Chlamydomonas*  
*reinhardtii*

Total charge:  
plastocyanin: -6 e.c.  
cytochrome f: -2 e.c.

*Phormidium*  
*laminosum*

Total charge:  
plastocyanin: -3 e.c.  
cytochrome f: -16 e.c.

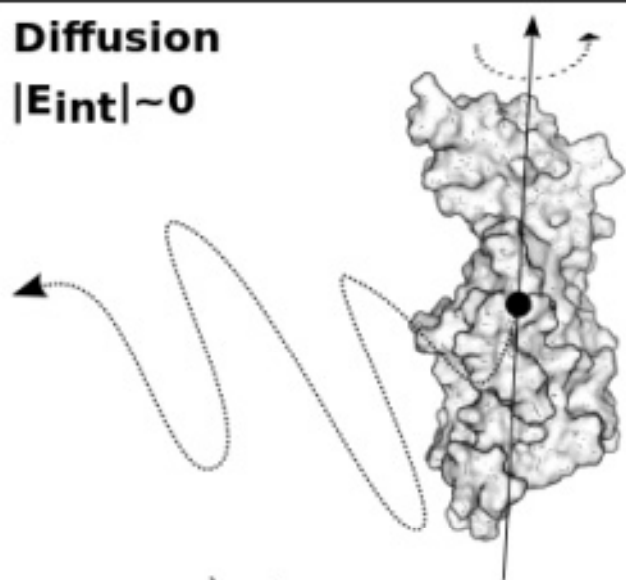
*Nostoc sp.*

Total charge:  
plastocyanin: +1 e.c.  
cytochrome f: -18 e.c.

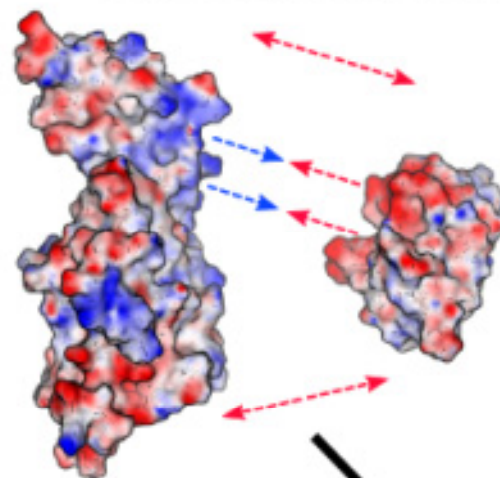




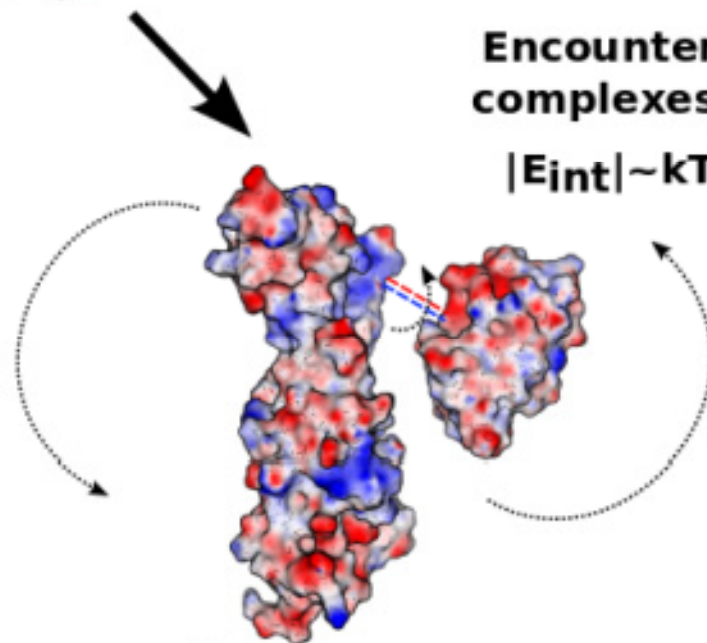
**Diffusion**  
 $|E_{int}| \sim 0$



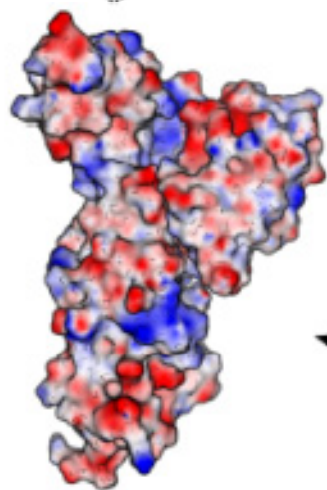
**Electrostatic interaction,  
converging and mutual orientation**  
 $|E_{int}| > 0$



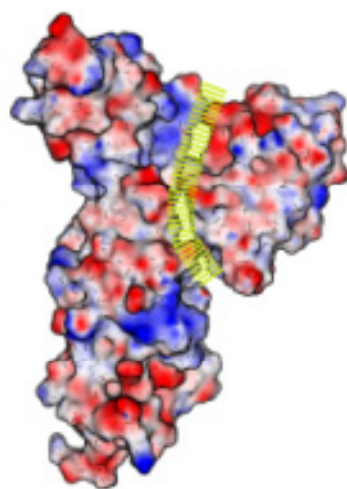
**Encounter  
complexes**  
 $|E_{int}| \sim kT$



**Final complex**  
 $|E_{int}| \gg kT$

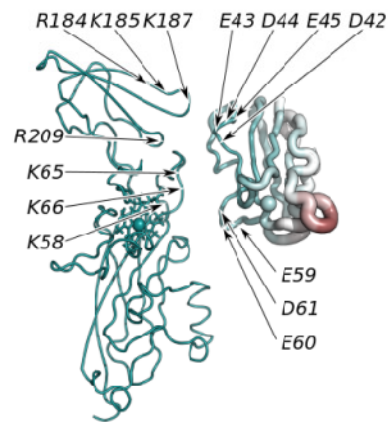


**Intermediate complex,  
conformational changes**  
 $|E_{int}| > kT$

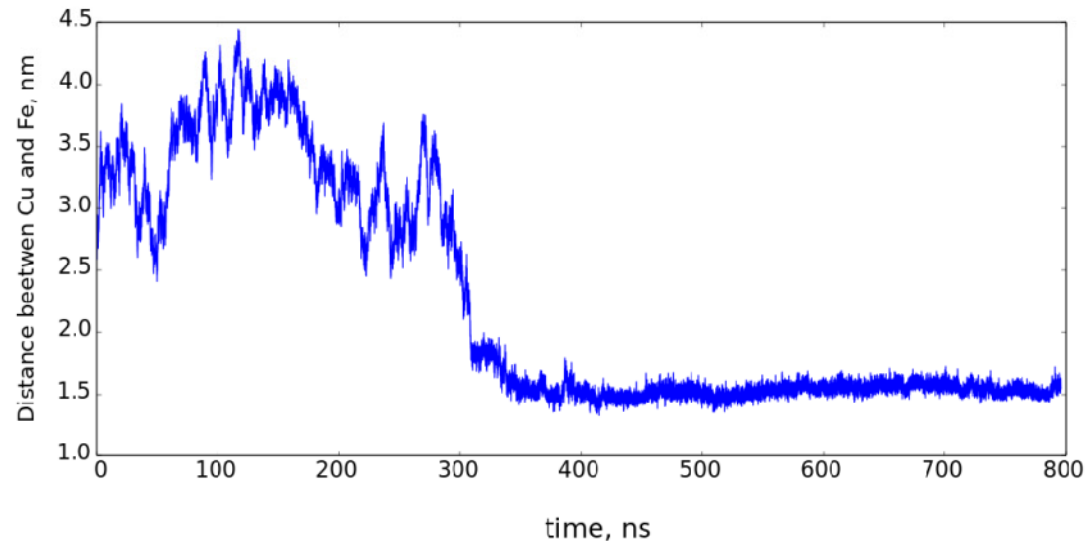


# Molecular dynamics of productive and non-productive encounter complex

**A1**



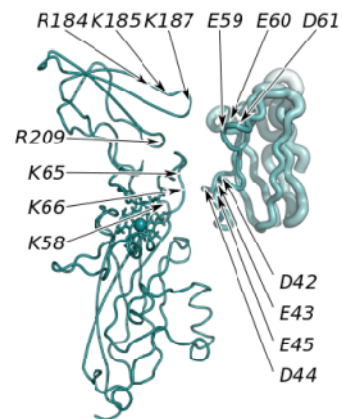
**A2**



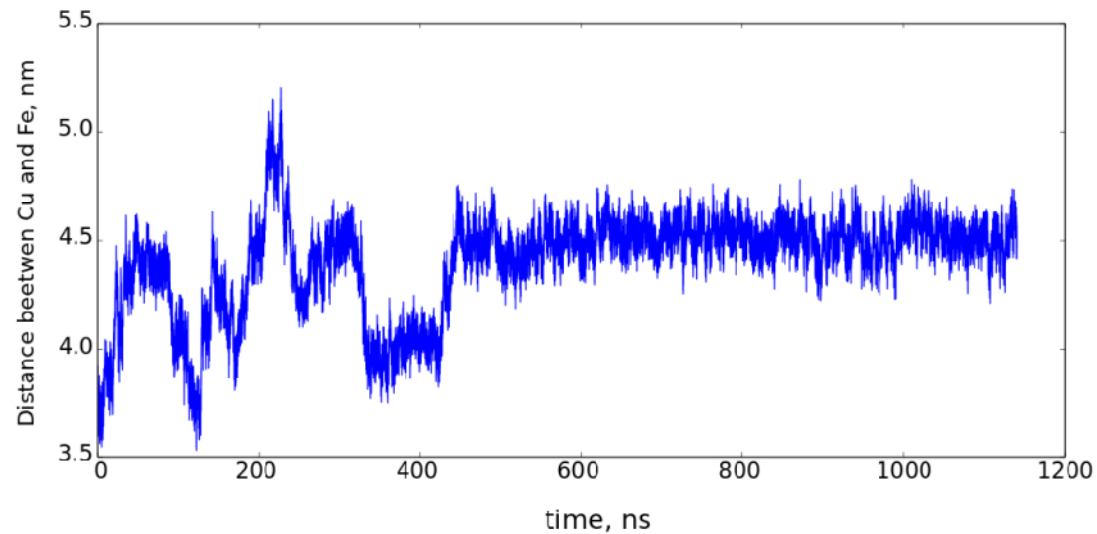
**A3**



**B1**



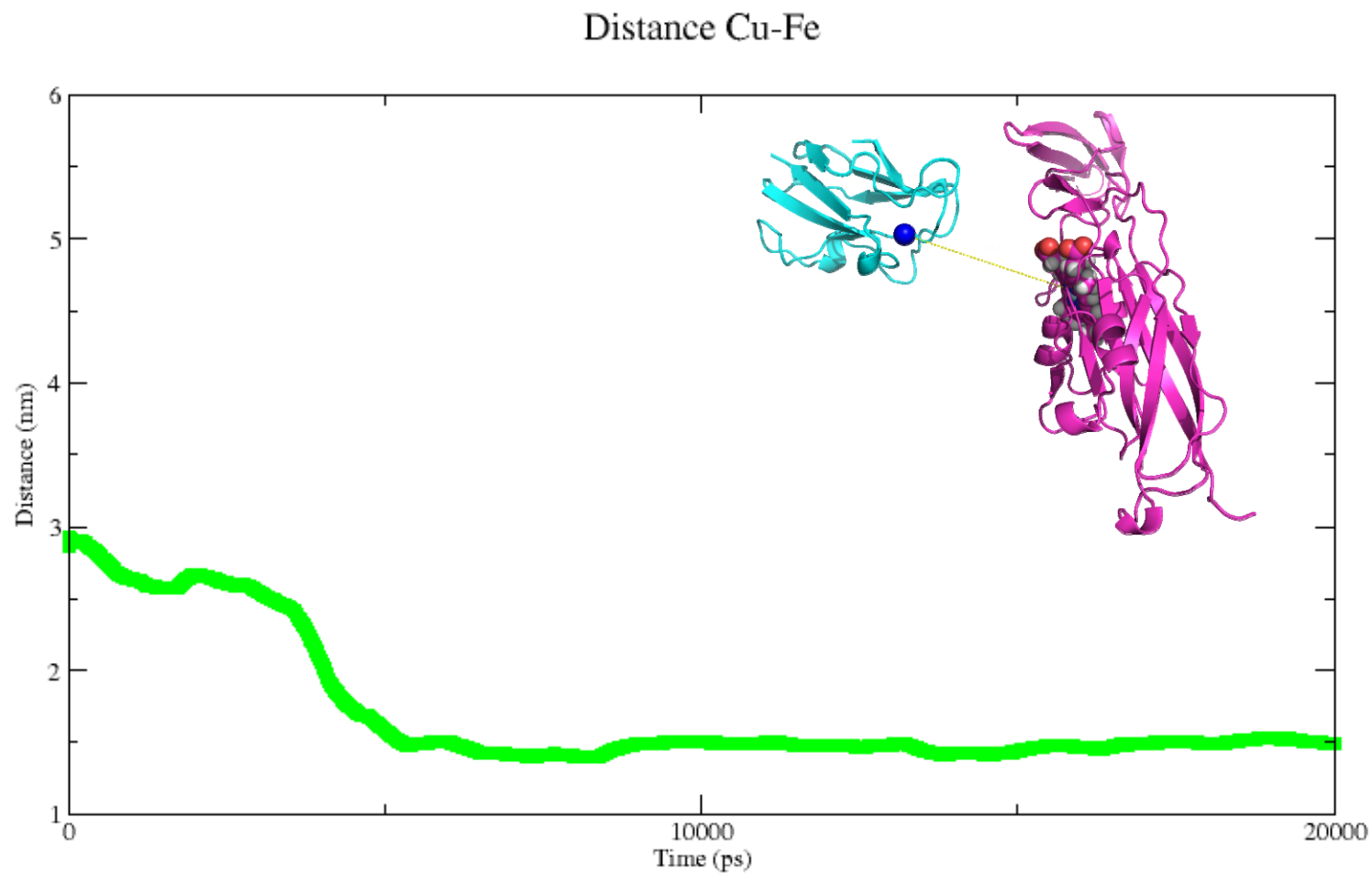
**B2**



**B3**



# Образование комплекса пластоцианина и цитохрома f

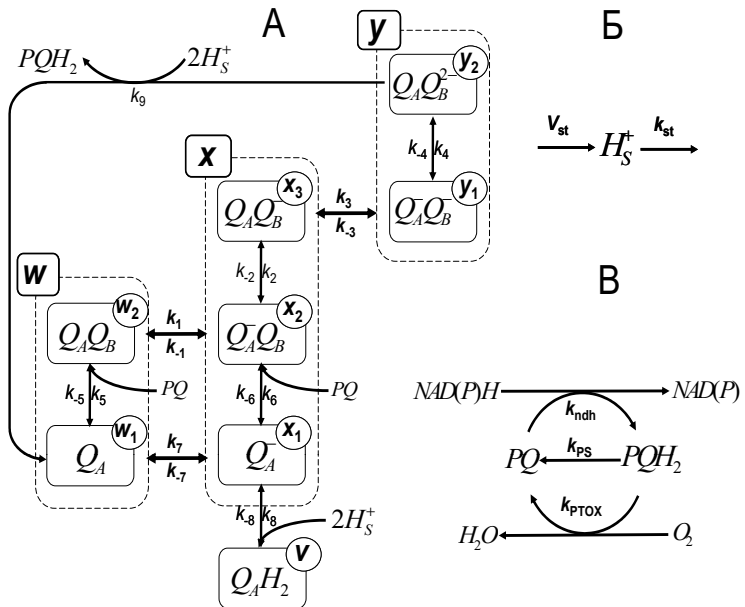


**Distance (nm) between Cu on plastocyanin and Fe on cytochrome f vs time (ps)**

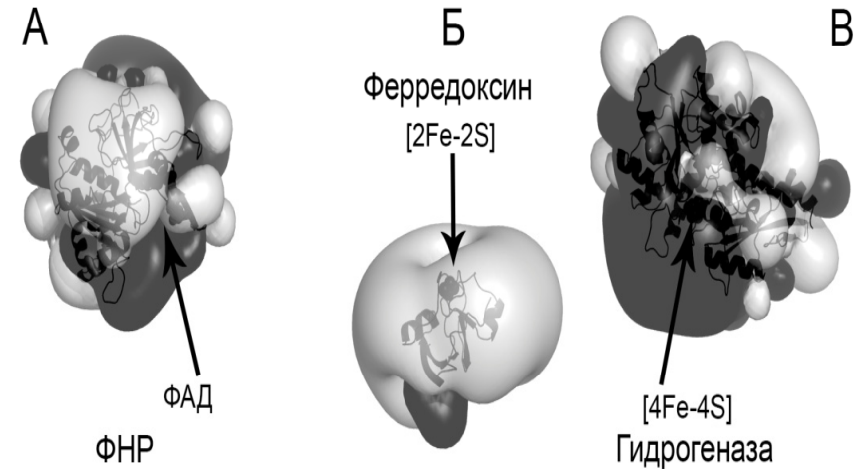




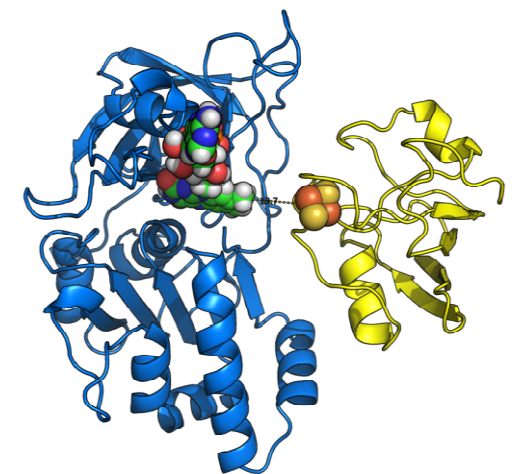
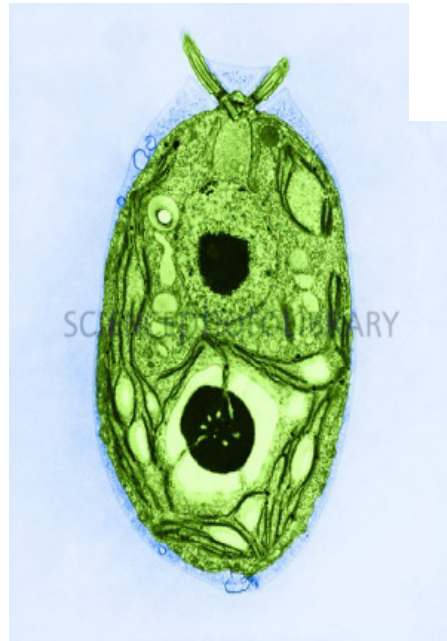
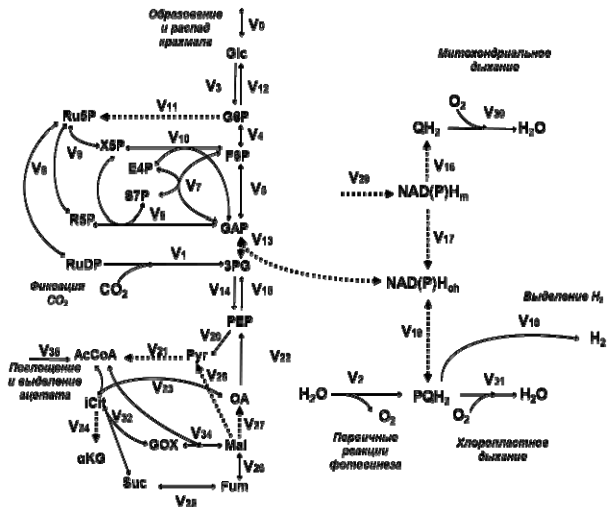
# Middle-out modeling strategy



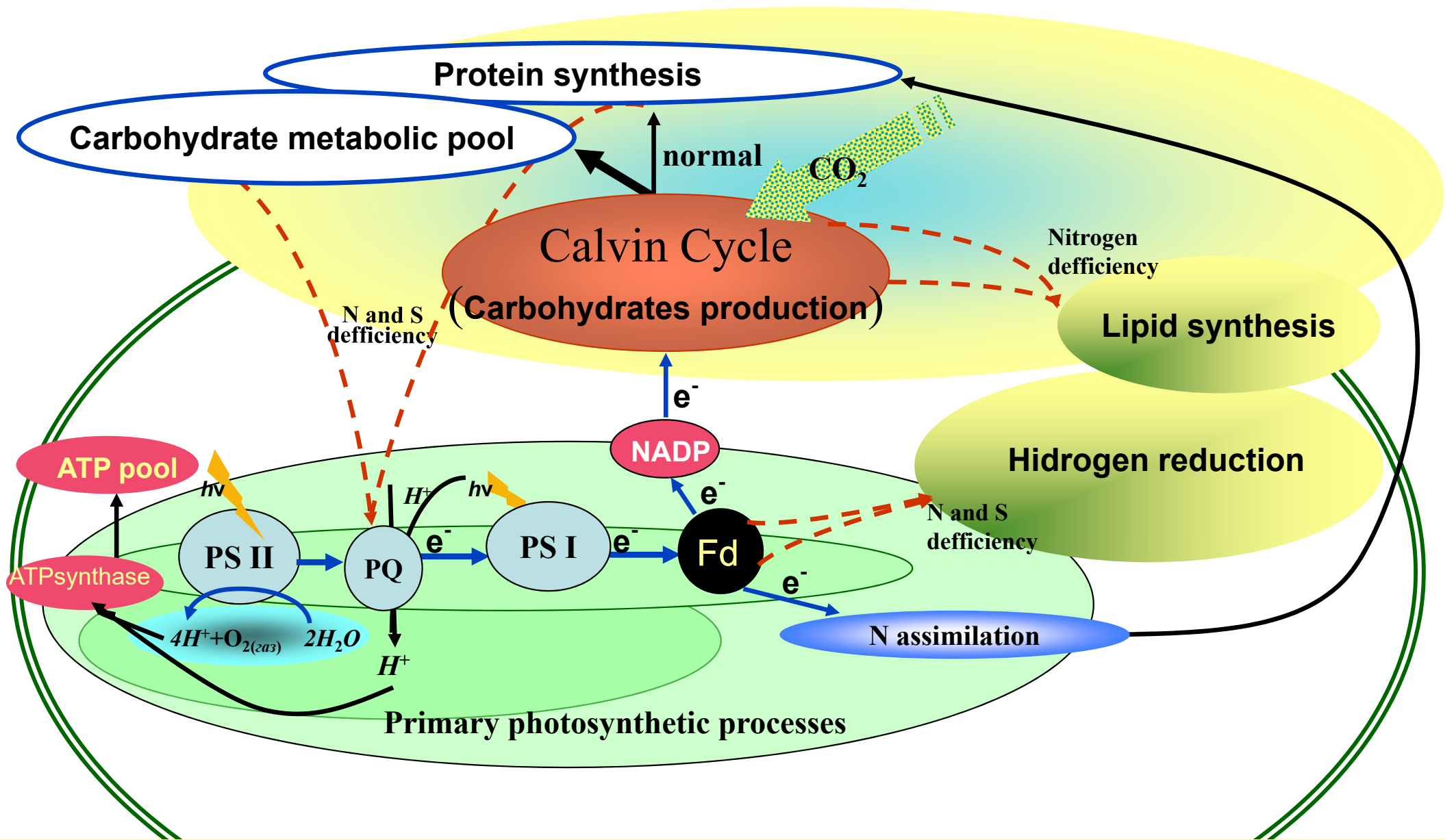
Плюснина и др., 2013, 2019



Dyakonova et al., 2016



Метаболические пути Плюснина и др., Биофизика, 2017



## Фотосинтез и сопряженные процессы



Biological and Medical Physics, Biomedical Engineering

Andrew Rubin  
Galina Riznichenko

# Mathematical Biophysics

Springer 2014

 Springer



БИОФИЗИКА  
МАТЕМАТИЧЕСКАЯ БИОЛОГИЯ

RCD 2011

Г. Ю. Ризниченко

## ЛЕКЦИИ

ПО МАТЕМАТИЧЕСКИМ  
МОДЕЛЯМ В БИОЛОГИИ

**R&C**  
*Dynamics*





спасибо за внимание

### Участники работы

- Н.Е. Беляева
- И.Б. Коваленко
- Т.Ю. Плюснина
- А.М. Абатурова
- А.Н. Дьяконова
- С.С. Хрущев
- А.М. Маслаков
- В. А. Федоров
- Проф. А.Б. Рубин





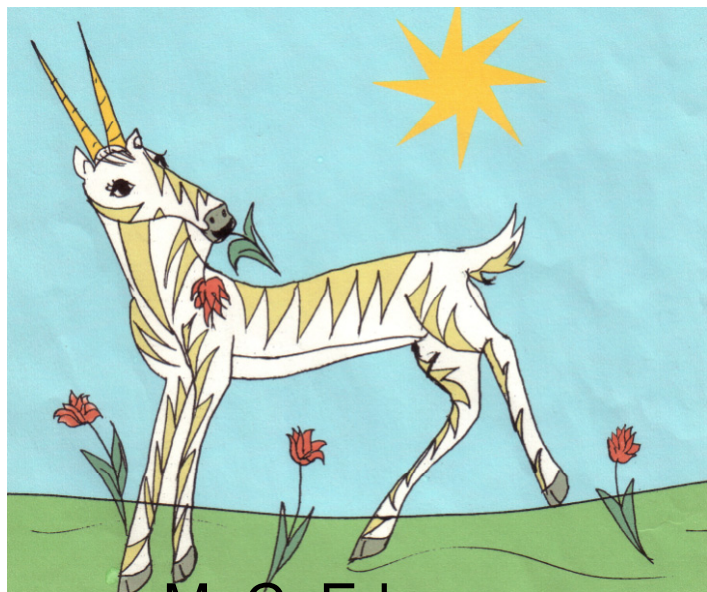
# МАТЕМАТИКА. КОМПЬЮТЕР. ОБРАЗОВАНИЕ – 30

Пущино 23-28 янв- 2023 [www.mce.su](http://www.mce.su)

Ежегодные зимние междисциплинарные научно-образовательные конференции

Дубна: 1994; 1996; 1998; 2000; 2002; 2004, 2006, 2008, 2010, 2012, 2014, 2016, 2018, 2020, 2022

Пущино: 1995; 1997; 1999; 2001; 2003; 2005; 2007, 2009, 2011, 2013, 2015, 2017, 2019, 2021, 2023



MaCoEd

с 2008

## Биофизика сложных систем

Молекулярное моделирование. Системная и вычислительная биология.