

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ β И γ СУБЪЕДИНИЦ НАНОМОЛЕКУЛЯРНОГО МОТОРА F_1 -АТФ СИНТАЗЫ

Булусова Л.С.

МГУ, Россия, 119992, Москва, ГСП-2, Ленинские горы, 939-2612, bul-lidia@yandex.ru

F_0F_1 -АТФаза – молекулярный мотор, который использует энергию протонного тока через комплекс F_0 для создания молекул АТФ. В изолированном фрагменте – комплексе F_1 (F_1 -АТФазе), в отсутствие комплекса F_0 , могут происходить как гидролиз АТФ (расщепление) так и синтез АТФ. При этом F_1 -АТФаза работает как мотор, внутри которого вращается γ субъединица по центру статора – состоящего из трех идентичных копий $\alpha\beta$ субъединиц. Вращение инициируется конформационными изменениями $3(\alpha\beta)$ субъединиц F_1 -АТФаза осуществляет превращение энергии химической связи молекулы АТФ во вращательную энергию ротора мотора – γ субъединицы. На основе обзора последних экспериментальных данных [1,2] в представленной работе предложена математическая модель взаимодействия гамма и бета субъединиц, основных элементов молекулярного мотора. По результатам обработки экспериментальных данных получена кинематическая связь между углом проворота ротора θ и β - углом раскрытия β субъединицы. Так же анализ экспериментальных данных позволил построить различные модели моментов сил, действующих на β и γ субъединицы. В частности в ходе моделирования момента сил, действующих на γ субъединицу были рассмотрены «ступенька», линейная и экспоненциальная функции. Это позволяет уточнить выражения для момента сил сорбции, возникающего при проникновении молекулы АТФ в каталитический центр β - субъединицы при

Для каждого из случаев рассмотренных в ходе моделирования получена временная развёртка. На основании полученных зависимостей построен фазовый портрет системы для β субъединицы.

Литература.

1. *Adachi K. et al*, Coupling of Rotation and Catalysis in F_1 -ATPase Revealed by Single-Molecule Imaging and Manipulation // *Cell*, **Vol 130**, 2007, 309-321
2. *Böckmann R, Grubmüller H.*, Nanoseconds molecular dynamics simulation of primary mechanical energy transfer steps in F_1 -ATP synthase // *Nature Struct. Bio*, **Vol 9**, 2004, 198-202