

# ФЛЮКТАЦИОННО-ДИНАМИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ПРОТОННОЙ АТФ-СИНТАЗЫ – ЭНЕРГОПРЕОБРАЗУЮЩЕЙ МОЛЕКУЛЯРНОЙ МАШИНЫ ЖИВОЙ КЛЕТКИ

Романовский Ю.М., Погребная А.Ф., Тихонов А.Н.

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

подавляющее число молекул АТФ ( $\approx 80\%$ ) – основной энергетической «валюты» живой клетки – производится мембранными АТФ-синтазами, являющимися самыми маленькими в природе молекулярными моторами с характерным размером  $\approx 10$  нм. АТФ-синтаза – обратимая молекулярная машина, способная катализировать как синтез, так и гидролиз АТФ. Встроенная в энергопреобразующую мембрану АТФ-синтаза, состоящая из неподвижного («статор») и подвижного («ротор») фрагментов, работает как вращающийся «электромотор». В режиме синтеза АТФ из АДФ и ортофосфата ( $P_i$ ) направленное вращение ротора протонной АТФ-синтазы обеспечивается за счет энергии трансмембранной разности электрохимических потенциалов ионов водорода ( $\Delta\mu_{H^+}$ ). В режиме гидролиза АТФ ротор АТФ-синтазы вращается в обратном направлении, обеспечивая генерацию  $\Delta\mu_{H^+}$ .

В докладе дается краткий обзор известных в литературе математических моделей, описывающих работу АТФ-синтазы [1-3], а также излагаются результаты моделирования динамики  $F_1$  АТФ в режимах синтеза и гидролиза АТФ в рамках разработанной нами флюктуационно-динамической модели [4]. Модель представляет собой систему 7 уравнений: динамического уравнения, описывающего вращение подвижной субъединицы  $\gamma$ , и 6 кинетических уравнений, описывающих кооперативные изменения состояний трех каталитических центров, связывающих АТФ, АДФ и  $P_i$ . Описывается взаимодействие между субъединицами  $\alpha$  и  $\beta$ , оценивается время проникновения молекул АТФ в активный центр. Результаты моделирования хорошо согласуются с литературными данными по кинематике вращения ротора протонной АТФ-синтазы.

## Литература

1. Xing Jianhua, Liao Jung-Chi, and Oster George, Making ATP // *PNAS*, v. 102, 2005, 16539–16546
2. Böckmann R, Grubmüller H., Nanoseconds molecular dynamics simulation of primary mechanical energy transfer steps in  $F_1$ -ATP synthase // *Nature Struct. Biol*, v. 9, 2004, 198-202
3. Adachi K. et al. Coupling of Rotation and Catalysis in  $F_1$ -ATPase Revealed by Single-Molecule Imaging and Manipulation // *Cell*, v.130, 2007, 309-321
4. Pogrebnaya A., Romanovsky Yu., Tikhonov A. Rotation of ATPase: The stochastic model // *Fluctuation and Noise Letters*, v.5, 2005, L217-L224