

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ СКОРОСТИ СИНТЕЗА ХЛОРОПЛАСТНОЙ АТФ-СИНТАЗЫ

Алексеев А.А.

МГУ имени М.В. Ломоносова, физический факультет, Россия, 119991, Москва,
Ленинские горы 1с2, alekseev@physics.msu.ru

Теоретическое описание кинетики АТФ-синтазы представляет собой важную задачу для моделирования процессов в хлоропластах и митохондриях. В хлоропластах эта молекулярная машина опосредует связь темновых и световых процессов фотосинтеза. В связи с этим, интерес представляет описание сигмоидной зависимости скорости синтеза АТФ от ΔpH мембраны хлоропласта[1].

Нам известен ряд моделей АТФ-синтазы, в которых скорость синтеза АТФ представлена в виде функции различных переменных: мембранного потенциала $\Delta\varphi$, трансмембранного протонного градиента ΔpH , а также концентраций АТФ, АДФ и неорганического фосфата[2, 3]. Также известны модели, содержащие функции скорости АТФ-синтазы, зависящие от величин pH с разных сторон митохондриальной мембраны[4]. Однако, в литературе мы не нашли модель АТФ-синтазы, в которой была бы получена зависимость скорости синтеза сразу от нескольких величин - ΔpH мембраны, pH с внешней стороны мембраны, концентраций АТФ и АДФ. В нашей модели мы использовали функцию сигмоиды для скорости синтеза $V_{ATP\,synth}(\Delta pH) = \frac{y_2 - y_1}{1 + \exp(-\alpha(\Delta pH - \Delta pH_{05}))} + y_1$, каждый из параметров которой определён как произведение двух явных функций от параметров pH_{out} ($\equiv pH$ стромы) и $Q = \frac{[ATP]c^o}{[ADP][P_i]}$: $y_1 = f_{11}(Q) \cdot f_{12}(pH_{out})$, $y_2 = f_{21}(Q) \cdot f_{22}(pH_{out})$, $\Delta pH_{05} = f_{31}(Q) \cdot f_{32}(pH_{out})$, $\alpha = f_{41}(Q) \cdot f_{42}(pH_{out})$. Параметры каждой из восьми функций f_{ij} , $i = \overline{1, 4}$, $j = \overline{1, 2}$ определялись путём фиттинга данных для скорости синтеза АТФ в зависимости от ΔpH при различных значениях параметра Q и pH_{out} из работ [1, 5]. В результате была получена модель для скорости синтеза АТФ при различных значениях трёх параметров - ΔpH , Q , pH_{out} .

Литература.

1. F. E. Possmayer and P. Graber The pHin and pHout Dependence of the Rate of ATP Synthesis Catalyzed by the Chloroplast H⁺-ATPase, CFoFr, in Proteoliposomes // *The Journal of Biological Chemistry* **269**, 3, 1994. pp. 1896-1904.
2. R. Anandkrishnan et. al. Biophysical comparison of ATP synthesis mechanisms shows a kinetic advantage for the rotary process // *PNAS* **113**, 40, 2016. pp. 11220-11225.
3. Nath, Sunil and Jain, Siddhartha Kinetic modeling of ATP synthesis by ATP synthase and its mechanistic implications // *Biochemical and biophysical research communications* **272**, 3, 2000. pp. 629-633.
4. S. Jain and S. Nath Kinetic model of ATP synthase: pH dependence of the rate of ATP synthesis // *FEBS Letters* **476**, 3, 2000. pp. 113-117.
5. P. Turina et. al. H⁺/ATP ratio of proton transport-coupled ATP synthesis and hydrolysis catalysed by CF0F1-liposomes // *The EMBO Journal* **22**, 3, 2003. pp. 418-426.