

# ВАЛИДАЦИЯ ЭМПИРИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ СКОРОСТИ ХЛОРОПЛАСТНОЙ АТФ-СИНТАЗЫ ДЛЯ РАЗНЫХ pH СТРОМЫ И ЛЮМЕНА

Алексев Алексей

МГУ имени М.В. Ломоносова, физический факультет, Россия, 119991, Москва,  
Ленинские горы 1 стр. 2, alekseev@physics.msu.ru

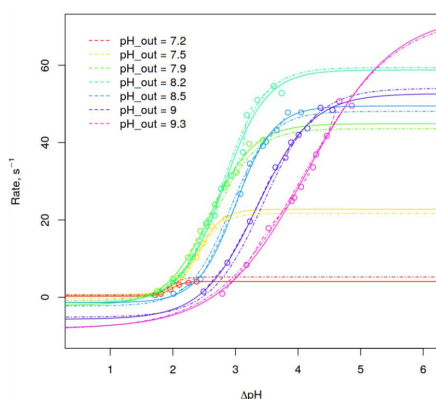


Рис. 1.  $V_{ATP_{synth}}(\Delta pH)$  для разных  $pH_{out}$

Описание зависимости скорости синтеза/гидролиза АТФ-синтазы от  $\Delta pH$ , которая имеет сигмоидную форму [1] - важная задача при биофизическом описании процессов в хлоропластах. В литературе имеется ряд работ, содержащих модели АТФ-синтазы (хлоропластной [2, 3] и митохондриальной [4]), в которых скорость синтеза АТФ представлена в виде функции различных переменных: мембранного потенциала  $\Delta\varphi$ , трансмембранного протонного градиента  $\Delta pH = pH_{in} - pH_{out}$ , а также концентраций АТФ, АДФ и неорганического фосфата. Однако, мы не нашли модель АТФ-синтазы, в которой была бы получена зависимость скорости синтеза сразу от нескольких величин -  $\Delta pH$  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 четырёх полиномиальных функций  $f_{i2}$ ,  $i = 1, 4$  определялись путём фиттинга данных для скорости синтеза АТФ в зависимости от  $\Delta pH$  при различных значениях параметра и  $pH_{out}$  из работы [1] (см. рисунок, сплошные линии - результаты непосредственного фиттинга параметров  $V_{ATP_{synth}}(\Delta pH)$ , сплошные - результаты с использованием функций  $f_{i2}$ ). Вычисления производились с помощью языка R (функция оптимизации `optim`). Как мы полагаем, качество оптимизации позволяет использовать функции с найденными параметрами как основу для получения полного набора функций модели  $f_{ij}$ .

## Литература.

1. F. E. Possmayer and P. Graber The  $pH_{in}$  and  $pH_{out}$  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.