

**Квантово-механическое описание транспорта протонов в ходе
каталитического цикла F_0F_1 -АТФсинтазы**

Научный руководитель – Машковцева Елена Валерьевна

Ивонцин Леонид Андреевич

Студент (магистр)

Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Факультет
экспериментальной и теоретической физики, Москва, Россия

E-mail: leonid-ivoncin@yandex.ru

F_0F_1 -АТФсинтаза - один из наиболее важных молекулярных моторов живой клетки, который является уникальным преобразователем энергии. Фермент катализирует синтез АТФ из АДФ и неорганического фосфата с использованием электрохимического градиента ионов водорода. Полученная энергия в форме АТФ необходима для протекания множества биологических процессов, таких как реакции биосинтеза, мышечное сокращение, перенос различных молекул через биологические мембраны и др. Мембранная часть фермента содержит два несоосных полуканала, по которым протоны переносятся через мембрану, однако полная информация об их строении и расположении в настоящее время отсутствует. Предполагается, что именно в процессе протонного транспорта происходит преобразование энергии трансмембранного протонного градиента и ее запасание для макроэргической связи АТФ.

Механизм протонного транспорта через заряженные центры (аминокислотные остатки полуканала и стохастически размещенные молекулы воды) описывается с помощью квантово-механического подхода, который учитывает, как энергию электростатического взаимодействия, так и чисто квантовые эффекты (туннелирование и локализация связанных состояний), характерные для микрочастиц. Моделирование методом Монте-Карло возможных путей движения протона через входной полуканал позволило установить, что без учета трансмембранной разности потенциалов чаще всего в реализуемых путях центрами связывания протона являются молекулы воды. Существует восемь молекул воды, через которые в модельной системе проходят все реализованные пути, что связано с довольно плотной упаковкой белковой структуры в центральной области.

При учете трансмембранной разности потенциалов в модели происходит уменьшение глубины потенциальных ям возле карбоксильных остатков, что в свою очередь увеличивает вероятность их участия в транспорте протона. Расчетное среднее время переноса протона не превышает 23 пс, что согласуется с общим временем каталитического цикла фермента.

Предложенная модель описания транспорта протона позволяет не только определить время переноса протона в реальных биологических условиях, но и проанализировать механизм трансформации и накопления энергии в процессе переноса, что может служить важным шагом на пути к пониманию всего механизма преобразования энергии в ходе каталитического цикла F_0F_1 -АТФсинтазы.