

Семинар 4: АТФ-аза

Задание по теме: описать эксперимент из работы [1], где проводилось исследование кинетики работы АТФ-азы на везикулах. Необходимо воспроизвести рис. 1

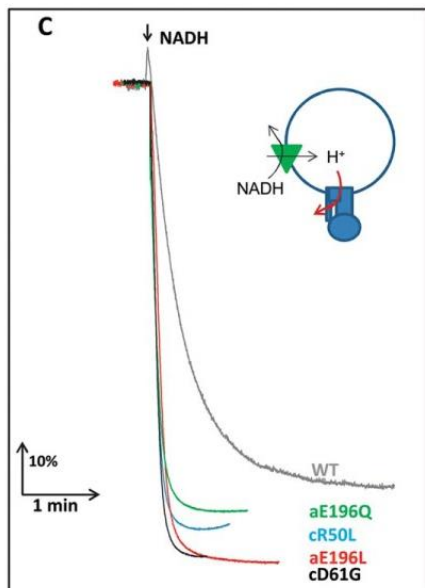


Рисунок 1: кинетика синтеза АТФ (измеряется снижение концентрации АДФ) в ответ на добавление NADH в среду.

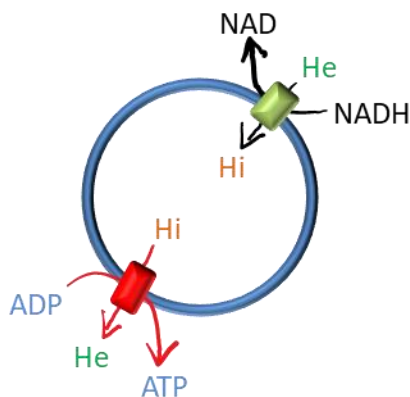


Рисунок 2: схема модели

Принципиально моделирование гетерогенной системы – везикула и мембрана – разные объекты. На семинаре работаем в предположении, что ротор содержит 3 субъединицы и за 1 оборот происходит синтез 1 молекулы АТФ. Домашнее задание – довести систему до 8 субъединиц ротора и 3х молекул АТФ.

Последовательность построения системы (рис. 2):

1. Создаем компартмент – везикулу, задаем ее объем исходя из данных: $d = 100 \text{ nm}$
2. Создаем компартмент – мембрану везикулы, задаем ее объем в предположении толщины мембраны 10 нм и в предположении сферичности везикулы.
3. Создаем компартмент – внешнее пространство. Задаем его объем в 1000 раз больше объема везикулы.
4. Создаем объемные вещества: Hi , He , NADH , NAD , ATP , ADP с учетом указанных в статье начальных концентраций: 10 mM NADH , 2 mM ADP . Важно обратить внимание на компартмент, в котором находится вещество.
5. Создаем реакцию NADH-дегидрогеназы: $\text{NADH} + \text{He} \rightarrow \text{NAD} + 2\text{Hi}$. Важно, чтобы реакция была приписана к мембране. Проверяем, что модель работает – протоны закачиваются в систему при добавлении NADH . Для добавления NADH можно использовать event (чтобы полностью симулировать эксперимент).
6. Рисуем блочно-стрелочную схему работы АТФ-азы. Основные принципы: движение ротора происходит при связывании протона, реакция синтеза АТФ энергетически нейтральна, затраты энергии требуются для диссоциации АТФ.
7. Реализуем схему в виде уравнений. Важно, что все состояния АТФ-азы расположены в мембране. Предполагаем, что энергетически все состояния ротора эквивалентны.