

МОДЕЛЬ ВЫСОКОЭФФЕКТИВНОГО ПРЕОБРАЗОВАНИЯ ЭНЕРГИИ КИНЕЗИНОМ

Шапочкина И.В.¹, Розенбаум В.М.²

¹Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь,
shapoch@mail.ru

²Институт химии поверхности им. А.А. Чуйко НАН Украины, Киев,
Украина, *vik-roz@mail.ru*

Известно, что движение кинезина (с двумя глобулярными головами) вдоль микротрубочки состоит из периодически повторяющихся циклов, каждый из которых можно условно разбить на четыре основных этапа [1]. Головы (см. рис. 1) попеременно находятся в состояниях, когда одна из них контактирует с тубулином микротрубочки (*attached*), а вторая содержит молекулу АДФ и пребывает в состоянии без контакта с микротрубочкой (*detached*). За один цикл длительностью $\tau \sim 10^{-3} \div 10^{-2}$ с (зависящей от концентрации АТФ в растворе) каждая голова проходит расстояние длиной 2 димера тубулина (8 нм), затрачивая энергию в $20 k_B T$ ($T \approx 300$ К), которая выделяется в результате реакции гидролиза АТФ ($ATP + H_2O \rightarrow ADP + P_i + 20 k_B T$). Молекула кинезина может развивать скорость около 800 нм/с и совершать работу против силы нагрузки до 5 пН.

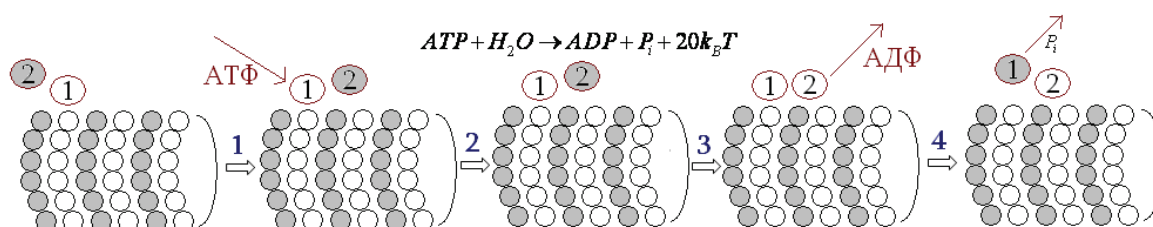


Рисунок 1 – Этап 1: голова 1 кинезина в состоянии *attached* связывает из окружения одну молекулу АТФ, в результате чего меняется конформация кинезина, и голова 2, содержащая АДФ, смещается вправо. Этап 2: гидролиз АТФ. Этап 3: диссоциация АДФ из головы 2 и она притягивается к микротрубочке. Этап 4: P_i освобождается из центра связывания АТФ и голова 1 переходит в состояние *detached*

Наиболее простой моделью, описывающей движение двухголового кинезина, является модель двух состояний, рассматривающая движение

броуновской частицы (кинезина) в эффективных потенциалах, претерпевающих сдвиги на полупериод $L/2$. Учитывая симметрию тубулина в микротрубочке, потенциал считается двухъямным (рис. 2). Для высокоэффективного преобразования энергии, сообщаемой частице при сдвигах потенциала, в полезную работу против силы нагрузки F_l необходимо, чтобы высокие барьеры заметно превышали тепловую энергию $V \gg k_B T$.

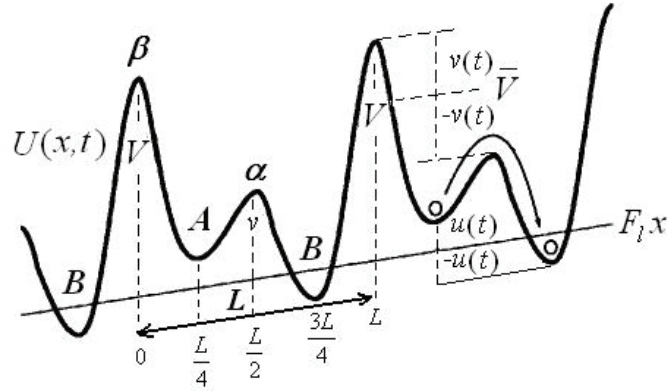


Рисунок 2

Отметим, что предположение относительно мгновенного изменения потенциального рельефа, активно используемое при построении дихотомных моделей, является идеализацией, которой в природе не существует. В реальности всегда имеется переходный процесс длительностью τ_0 , характеризующей быстроту изменения потенциальной энергии. Малость параметра τ_0 определяется его сопоставлением с собственным временным параметром системы, которым для броуновского мотора с потенциальным рельефом, описываемым плавной функцией координаты, может служить характерное время диффузии частицы τ_D на периоде L потенциальной энергии. Например, в случае биологических моторов длительности конформационных переходов в белковых молекулах лежат в интервале $10^{-4} - 10^{-3}$ с [2], а $\tau_D \sim 10^{-3}$ с [3], так что времена τ_0 и τ_D могут оказаться одного порядка. Поэтому анализ зависящих от τ_0 неадиабатических поправок имеет важное прикладное значение.

В работе [4] нами было показано, что при учете ненулевых времен τ_0 переходных процессов эффективность преобразования энергии понижается. Это понижение при условиях $w_0 \tau_0 \ll 1$, $w_0 \tau \equiv \xi^{-1} \gg 1$, но $w_0 \tau e^{-2v_0} \ll 1$ ($w_0 = k e^{-v/k_B T}$, k – предэкспоненциальный фактор, зависящий от коэффициента диффузии и кривизны потенциального профиля в точках максимума и минимума) приводит к следующему асимптотическому поведению эффективности:

$$\eta_m \approx 1 - 2\sqrt{2\xi^{-1}e^{-2\nu_0} + w_0\tau_0/\nu_0^3}, \quad \nu_0 = (V - \nu)/2k_B T.$$

График зависимости $1 - \eta_m$ от ν_0 приведен на рисунке 3.

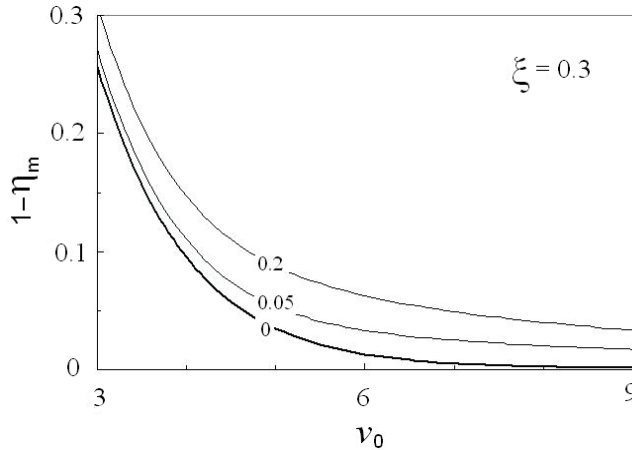


Рисунок 3 – Роль длительностей $w_0\tau_0$ переходных процессов (указаны на кривых) в ограничении высокой эффективности броуновского мотора

При достаточно больших ν_0 отклонение эффективности от единицы определяется степенным законом $\nu_0^{-3/2}$ и обусловлено учетом ненулевого времени τ_0 переходного состояния. Следует иметь в виду, что рассчитанная эффективность, определенная отношением полезной работы к энергии, передаваемой частице при флуктуациях потенциала, не учитывает ту часть энергии гидролиза АТФ (в $20 k_B T$), которая расходуется на флуктуации самого модельного потенциала. Поэтому реальные значения эффективности, измеряемые в энергозатратах «биологического топлива», могут быть существенно меньшими. Тем не менее, высокой эффективности рассматриваемого биологического механизма можно ожидать именно при тех условиях, которые представлены в данном сообщении.

Литература

1. Gilbert S.P., Webb M.R., Brune M., Johnson K.A. Pathway of processive ATP hydrolysis by kinesin // Nature. – 1995. – Vol. 373. – P. 671-676.
2. Park H. Y., Kim S. A., Korlach J., Rhoades E., Kwok L. W., Zipfel W. R., Waxham M. N., Webb W. W., Pollack L. Conformational changes of calmodulin upon Ca²⁺ binding studied with a microfluidic mixer// Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. – 2008. – Vol. 105, No.2. – P. 542-547.
3. Astumian R. D. Thermodynamics and kinetics of a Brownian motor // Science. – 1997. – Vol. 276. – P. 917-922.
4. Rozenbaum V. M., Shapochkina I. V. Quasiequilibrium directed hopping in a time-dependent two-well periodic potential // Phys. Rev. E. – 2011. – Vol. 84. – P. 051101-1 – 051101-12.