

О МЕХАНИЗМЕ ВРАЩЕНИЯ РОТОРА FOF1 Na⁺-АТФ-СИНТАЗЫ, МОТОРА БАКТЕРИАЛЬНЫХ ЖГУТИКОВ И МЕХАНИЗМЕ РАБОТЫ ИОННОЙ ПОМПЫ

Васильева-Вашакмадзе Н.С.

Инженерная академия Грузии

ул. М. Костава, 77, корп. 8, Тбилиси, 10175, Грузия; e-mail: engacad@mail.ru, e-mail: nonavas@rambler.ru

Поступила в редакцию: 29.06.2018

Аннотация. В данной работе рассматривается возможный механизм вращения молекулярного ротора на примере FOF1 Na⁺-АТФ-синтазы *Liobacter tartaricus*, *Propionigenium modestum*; механизм, лежащий в основе вращающего момента бактериальных жгутиков, а также возможный физический принцип, обеспечивающий работу ионной помпы - активного ионного транспорта. Показано, что механизм вращения молекулярных роторов, а также механизм переноса ионов против градиента концентрации – одинаков как для протонной, так и для натриевой биоэнергетики.

Ключевые слова: механизм вращения молекулярных моторов, вращающий момент ротора АТФ-синтаз, вращающий момент базальных телец бактериальных жгутиков, механизм активного транспорта ионов.

Функционирование живых организмов обеспечивается работой микроскопических систем – "молекулярных машин" - АТФ-синтаз, ионных помп АТФ-аз, базальных телец и т.д., механизмы которых, однако, ненаблюдаемы в принципе. Поэтому представляется целесообразным изучение механизмов этих систем с привлечением теоретических методов. Экспериментальный материал, а также законы биоэнергетики могут служить основой для поиска природы сил, создающих вращающий момент, способный приводить в движение роторы АТФ-синтаз, а также силы, переносящей ионы против градиента концентрации [1-5].

Известно, что протонные, как и натриевые FOF1 АТФ-синтазы (*Liobacter tartaricus*, *Propionigenium modestum*) имеют практически одинаковую структуру и конфигурацию - состоят из двух больших компартаментов - FO, F1 и малых (минорных) структур [6, 7]. Поэтому иногда приемлемо называть тип АТФ-синтазы, например "FOF1 Na⁺АТФ-синтаза", не упоминая организм, из которого получен этот фермент.

Обязательными элементами молекулярных "моторов" являются статор и ротор, а функционирование осуществляется вращением ротора при участии статора за счёт энергии от внешних источников, преобразованной в протонный или натриевый потенциал.

FOF1 Na⁺ АТФ-синтаза. В первой части нашей работы на примере FOF1 Na⁺ АТФ-синтазы из *Liobacter tartaricus*, *Propionigenium modestum* высказывается предположение, что в основе механизма вращения ротора FOF1 Na⁺АТФ-синтазы и других подобных молекулярных моторов лежит совокупность факторов, главные из которых - изменение трансмембранного потенциала при активировании клеток, вызывающее электрическую поляризацию – возникновение локальных кратковременных электронных токов в белковых субъединицах статоров; открытый ещё М. Фарадеем эффект образования магнитного поля вокруг движущихся зарядов, независимо от причины возникновения их движения; способность силы Лоренца создавать вращающий момент, действующий на заряды, движущиеся под углом к магнитному полю.

Во второй части рассматривается возможный принцип, лежащий в основе работы ионной помпы – активного транспорта ионов, осуществляемого Na⁺, K⁺-АТФ-азой (и аналогично -H⁺, K⁺АТФ-азой).

Показано, что в основе механизма "активного транспорта" ионов, при котором ионы Na⁺ (или H⁺) в процессе работы АТФ-аз выходят в экзоплазму, лежит совокупность факторов, из которых важными являются: различие между свойствами ионов с положительной (Na⁺, H⁺) и отрицательной (K⁺) гидратацией; аддитивность диамагнитной восприимчивости многоатомных комплексов; действие выталкивающей силы надиамагнитные ионы в неоднородном магнитном поле. Делается вывод, что это приводит (при определённых дополнительных условиях) к выбросу ионов Na⁺ (или H⁺) в экзоплазму.

Электрические и магнитные поля живых организмов. Прижизненные процессы животных, включая человека - передача нервных импульсов, работа мышечных клеток, сердца и т.д. сопровождаются появлением электрических и магнитных полей, которые фиксируются только при жизни и исчезают после гибели живого организма. Специальные установки – электро- и магнито - энцефалографы; «СКВИД»-ы, миографы, электро- и магнито - кардиографы и т.д. фиксируют прижизненные электрические и магнитные поля [8-11].

Известно, что в природе источниками электрических полей могут быть как движущиеся, так и неподвижные электрические заряды, в то время как причиной появления магнитных и электромагнитных полей могут быть только движущиеся заряды - электроны, ионы (относительно неподвижной системы отсчёта). Особенностью этих полей является то, что они исчезают вместе с прекращением движения зарядов [12].

Одним из видов движения зарядов в живых организмах являются ионные токи в ионных каналах, а также поляризация - локальный кратковременный сдвиг электронной плотности - «воротные токи», предшествующие ионным токам. [13, 14]. При функционировании живых организмов, которое обеспечивается работой "молекулярных машин", в том числе АТФ-аз, АТФ-синтаз, базальных телец и т.д., обнаруживается движение электронов и ионов – воротные и ионные микроскопические токи, которые являются источниками микроскопических, электрических, магнитных и электромагнитных полей [10, 11, 15].

Ионные каналы. Ионные каналы АТФ-аз, статоров FOF1 АТФ-синтаз, а также жгутиков бактерий, пронизывают насквозь цитоплазматическую мембрану клеток, оболочку бактерий или внутреннюю мембрану митохондрий. При этом, взаимно-противоположные - дистальные устья ионных каналов АТФ-аз, как и каналов FOF1 АТФ-синтаз попадают в зоны с различным ионным составом и соответственно, согласно известному соотношению Нернста - Гольдмана - электрической разностью потенциалов:

$$\varphi = \frac{RT}{F} \ln \frac{\sum_k c_k^e p_k^e}{\sum_k c_k^i p_k^i}, \tag{1}$$

где φ – трансмембранная разность потенциалов; R – универсальная газовая константа; T – абсолютная температура; F – число Фарадея; C_k^e, C_k^i – концентрация ионов -того типа соответственно в экзо- и цитоплазму; P_k^e, P_k^i – проницаемость ионов k -типа в экзо- и цитоплазму. Вследствие известных особенностей локализации и ориентации ионных каналов, их α - спиральные субъединицы белковых компонент в состоянии покоя поляризованы (поскольку их внешнее и внутреннее устья выходят соответственно в зоны с различающимся ионным составом), т.е. обладают изначальным электрическим дипольным моментом \vec{D}_0 [12, 18]:

$$\vec{D}_0 = \alpha \vec{E}_0; \vec{E}_0 = \frac{\varphi_0}{l} \vec{n}, \tag{2}$$

где φ_0 – трансмембранный потенциал покоя; \vec{E}_0 – напряжённость электрического поля в толще мембраны; l – толщина мембраны. При изменении трансмембранной разности потенциалов φ_0 изменятся и электрический дипольный момент α - спиральных белковых субъединиц, образующих стенки ионного канала, пронизывающего мембрану. По определению, электрический дипольный момент молекулы можно представить в следующем виде [12, 16, 17]:

$$\vec{D} = \sum_k z_k e n_k \vec{r}_k, \tag{3}$$

где \vec{D} – электрический дипольный момент молекулы; z_k, e, n_k, \vec{r}_k – соответственно заряд, число и радиус-векторы зарядов k -того типа. Известно, что трансмембранная разность потенциалов создаёт напряжённость электрического поля в толще мембраны:

$$\vec{E} = -grad\varphi, \tag{4}$$

где \vec{E} – напряжённость электрического поля; φ – трансмембранная разность потенциалов; l – толщина разделяющей мембраны. Внешнее устье цитоплазматического ионного канала открывается в эктоплазму, а внутреннее – в цитоплазму. Поэтому любое изменение ионного состава в локальной области вокруг внешнего или внутреннего устья ионного канала вызывает изменение градиента концентрации ионов и соответственно - трансмембранной разности потенциалов (1), что сопровождается электрической поляризацией – внутримолекулярным сдвигом электронной плотности - локальным "воротным" током [13, 14, 16]. Локальное смещение электронной плотности может происходить вдоль химических связей в белковых α -спиралях, что подтверждается экспериментальными наблюдениями [18, 19]. Сдвиг зарядов в белковых субъединицах ионного канала сопровождается изменением электрического дипольного момента α – спиральных белковых субъединиц:

$$\vec{D} = \vec{D}(t) = \alpha \vec{E}(t); \tag{5}$$

$$\vec{D}(t) = \sum_k z_k e n_k \vec{r}_k(t); \tag{6}$$

$$\frac{d\vec{D}}{dt} = \sum_k z_k e n_k \vec{v}_k = \vec{J}(t), \tag{7}$$

где \vec{D} – электрический дипольный момент; \vec{E} определено соотношением (4). Сдвиг зарядов – локальный ток $\vec{J}(t)$ (7) – это поляризационный процесс, который в химической номенклатуре называют мезомерным эффектом, если смещение электронной плотности происходит по системе π -электронных связей и индуктивным эффектом, если смещение электронной плотности происходит по σ -связям [19]. Движение зарядов в белках инициирует аллостерический эффект, т.е. изменение пространственной конфигурации или конформационный сдвиг в α -спиральных субъединицах [16]. В рамках классического подхода, а также на основе квантовой теории можно показать, что локальный ток в α -спиральных белковых молекулах порождает деформирующую силу, которая способна вызвать изменение пространственной конфигурации подобных систем и в частности – аллостерический эффект [20].

Применяя классический подход, деформирующую силу можно оценить, используя соотношение [16, 20]:

$$\vec{F}(t) = \frac{\mu_0 \mu}{4\pi} \frac{N^2}{l} s J^2(t), \tag{8}$$

где $\overline{F(t)}$ – деформирующая сила; N, S, l – соответственно - число витков, поперечное сечение и длина α -спирали; $\vec{J}(t)$ – поляризационный ток, т.е. сдвиг электронной плотности вдоль межатомных связей; μ_0, μ – магнитная постоянная и магнитная проницаемость.

Молекулярные машины. Известно, что молекулярные машины не могут функционировать, т.е. совершать работу за счет внутримолекулярных сил. Это противоречит закону сохранения энергии – фундаментальному закону природы. Работа любых систем, в частности, вращение ротора АТФ-синтазы осуществляется с помощью заложенных в них Природой механизмов, преобразующих энергию от внешних источников через промежуточные виды энергии в механическую работу (законы биоэнергетики [1]). Наряду с механизмом вращения молекулярных моторов нас интересует вопрос о том, как осуществляется активный транспорт ионов в АТФ-азах, а также в FOF1 Na⁺-АТФ-синтазах из *Pyobacter tartaricus* и *Propionigenium modestum*, когда эти молекулярные машины выполняют роль ионной «помпы» [6,7]. Трудность заключается в том, что силы природы в принципе невидимы, хотя результат их действия можно наблюдать. Прежде чем рассмотреть силы, обуславливающие активный транспорт ионов, мы остановимся на механизме вращения ротора FOF1 Na⁺ АТФ-синтазы.

Различие между ионными токами и поляризационными – «воротными токами». Поляризация молекул – это эффект смещения зарядов под действием внешнего электрического фактора, например, изменения электрохимического градиента, когда заряды (например, электроны) не покидают молекулу, а только смещаются в пределах молекулярного комплекса вдоль химических связей (часто его именуют мезомерным эффектом), образуя кратковременный локальный ток [13, 14, 18, 19]. Локальное смещение зарядов – «воротный» ток в α -спиральной белковой субъединице, т.е. поляризация, сопровождается изменением её электрического дипольного момента (если изначально она обладала им) или образованием дипольного момента (если она им не обладала). В отличие от поляризационного процесса (локального сдвига зарядов в пределах молекулы), ионный ток в открытом ионном канале представляет собой движение зарядов (ионов), не связанных с молекулой, из экзоплазмы в цитоплазму или наоборот.

Микроскопическое кратковременное магнитное поле «воротных» и ионных токов. Вокруг движущихся зарядов, независимо от причины, вызывающей их движение (это имеет место и в случае движения электронов в электронно-транспортной цепи), всегда возникает магнитное поле, исчезающее вместе с прекращением движения зарядов [12, 16, 17, 20]. Поэтому как воротные, так и ионные токи сопровождаются появлением магнитных полей, различающихся, однако, продолжительностью, направлением, формой и интенсивностью, в зависимости от конфигурации и интенсивности тока.

FOF1 Na⁺ АТФ-синтаза *Propionigenium modestum*, *Pyodacter tartaricus*. Ротор или С-кольцо FOF1 Na⁺-АТФ-синтазы *Propionigenium modestum*, как и *Ilyodacter tartaricus* [6, 7] пространственно сближено, но не связано химической связью со статором – неподвижной компонентой. **ab₂** Компонента статора **ab₂** состоит из двух α -спиральных белковых нитей (рис. 1). Начиная от вершины F1, компонента **ab₂** обгибает поверхность F1, локализованную в цитоплазме и, пересекая мембрану, выходит в экзоплазму. Поэтому верхушка статора **ab₂** и его основание оказываются соответственно в зонах с разным ионным составом, между которыми существует согласно соотношению (1) трансмембранная разность потенциалов. Изменение ионного состава в экзоплазме при внешних воздействиях, равно как и изменения в цитоплазме, могут вызвать сдвиг разности потенциалов между внешним и внутренним устьем ионного канала, проходящего сквозь статор компоненту **ab₂**. Изменение разности потенциалов сопровождается электрической поляризацией α -спиральных субъединиц белковой компоненты ионных каналов статора.

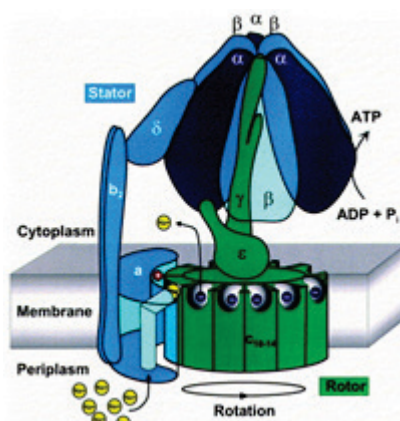


Рисунок 1. FOF1 Na⁺-АТФ - синтаза *Propionigenium modestum* [6]. Компартмент FO (на рисунке обозначен как ротор) напоминает ножку гриба, находящуюся в цитоплазматической мембране и вдаётся в экзоплазму. F1 (обозначен как статор) похож на шляпку гриба и локализуется в цитоплазме. Ионные каналы статора проходят сквозь компартмент **ab₂**, который пронизывает насквозь цитоплазматическую мембрану. Внешнее устье ионного канала открывается в экзоплазму, а внутреннее – в цитоплазму. Вращающаяся субъединица γ , заякоренная в центре ротора, образует связующий перешеек между FO и центральной зоной компартмента F1, полностью находящегося в цитоплазме

Как показывают электронно-микроскопические снимки (рис. 1), ротор представляет собой белковый комплекс, по форме близкий к цилиндрической, образованный 8-15 пачками из α -спиральных субъединиц. Это С-диск, который погружен в толщу цитоплазматической мембраны. Нижнее основание С-диска контактирует с экзоплазмой (или периплазмой, которая благодаря порам связана с экзоплазмой). В центре верхнего основания С-диска закорена субъединица γ , ориентированная перпендикулярно к его поверхности. Субъединица γ пересекает цитоплазматическую мембрану и продолжается в цитоплазме, проходя через просвет в нижней части компартамента F1 и достигает его вершины (рис. 1). Как известно, между цито- и экзоплазмой в бактериях и живых клетках поддерживается разность потенциалов φ_0 , связанная с различием ионного состава между этими зонами. Поскольку субъединица γ , закоренная в центре С-диска связана с цитоплазмой, а периферия – с экзоплазмой (рис. 1), то разность потенциалов между центром С-диска, в котором локализовано основание субъединицы γ и периферией С-диска в состоянии покоя совпадает с трансмембранной разностью потенциалов φ_0 и напряжённостью \vec{E}_0 :

$$\vec{E}_0 = -grad\varphi_0. \tag{9}$$

Изменение ионного состава в цитоплазме или экзоплазме клетки может вызвать изменение трансмембранной разности потенциалов φ и напряжённости \vec{E} , а следовательно и величины напряжённости электрического поля между центром С-диска и его периферией, поскольку центр С диска через субъединицу γ проникает в цитоплазму, а периферия С-диска контактирует с экзоплазмой клетки.

При достаточно больших значениях \vec{E} в электрическом поле возникает движение зарядов под действием силы $\vec{F} = q\vec{E}$. В данном случае это - радиальный локальный ток между центром и периферией С-диска.

Магнитное поле в ионном канале статора FOF1 Na⁺-АТФ-синтазы. При функционировании FOF1 Na⁺-АТФ-синтазы изменение ионного состава в цито- или экзоплазме инициирует изменение трансмембранной разности потенциалов, а, следовательно, разности потенциалов между нижним и верхним устьем ионного канала, проходящего сквозь статор - комплекс ab_2 , пронизывающий цитоплазматическую мембрану. При этом возникает поляризационный процесс – сдвиг зарядов в α -спиральных белковых субъединицах, образующих стенку ионного канала. Согласно законам электромагнетизма, вокруг тока любого происхождения, в том числе и поляризационного тока (локального сдвига зарядов), формируется магнитное поле. В случае вортного тока магнитное поле направлено вдоль большой оси α -спирали [16, 17, 21]:

$$\vec{B} = \mu_0\mu \frac{N}{l} J \vec{n}, \tag{10}$$

где \vec{B} – индукция магнитного поля; μ_0 - магнитная постоянная; μ – магнитная проницаемость, N – число витков; l – длина α -спирального фрагмента; J – поляризационный локальный ток, в α -спиральной субъединице; \vec{n} – единичный вектор, направленный вдоль оси α -спирали.

При $\mu_0\mu = 4\pi \cdot \frac{10^{-7} Гн}{м}$; $N \sim 10^3$; $l \sim 10^{-7} м$; $J \sim 10^{-15} А$, получим $\vec{B} \sim 10^{-10} Тл$.

Поскольку ионный канал статора ab_2 пронизывает цитоплазматическую мембрану, то магнитное поле вортного тока ориентировано перпендикулярно к поверхности мембраны. Его действие ощутимо вблизи внешнего и внутреннего устья. Магнитное поле не локально, и потому ротор FOF1 АТФ - синтазы (С-кольцо) попадает под действие магнитного поля статора (10). Заряды, движущиеся радиально в с - диске ротора находятся под действием силы электрического поля $\vec{F}_1 = q\vec{E}$. Приобретая скорость \vec{v} , заряды начинают испытывать влияние силы магнитного поля статора: $\vec{F}_2 = q[\vec{v}\vec{B}]$. Таким образом, результирующая сила – это сила Лоренца, которая складывается из двух составляющих – \vec{F}_1 и \vec{F}_2 (11).

$$\vec{F} = \vec{F}_1 + \vec{F}_2; \vec{F} = q\vec{E} + q[\vec{v}\vec{B}]; \tag{12}$$

$$\vec{F}_1 = q\vec{E}; \vec{F}_2 = q[\vec{v}\vec{B}], \tag{13}$$

где q, v – соответственно заряды и их скорость в роторе; \vec{B} – магнитное поле (10), порождаемое статором. Составляющая \vec{F}_2 придаёт радиальную скорость \vec{v} зарядам. Сила \vec{F}_2 действует перпендикулярно к направлению движения зарядов и поэтому создаёт вращающий момент \vec{N} , действующий на радиально движущиеся заряды:

$$\vec{F}_2 = q[\vec{v}\vec{B}] \rightarrow \vec{N} = q[\vec{R}\vec{F}_2]. \tag{14}$$

Под действием вращающего момента \vec{N} (14) радиальный ток зарядов С-диска начинает вращаться и увлекает за собой всю систему ротора, включая жёстко связанную с ним субъединицу γ . При повороте основания субъединицы γ , закоренной в центре ротора АТФ-синтазы, её противоположный конец вращается в просвете компартамента F1 между компонентами $\alpha_3\beta_3$, что обеспечивает работу фермента. Существенно, что

при повороте ротора не меняется взаимно - перпендикулярная ориентация радиальной скорости \mathbf{v} зарядов С-кольца относительно индукции $\vec{\mathbf{B}}$ магнитного поля статора. Поэтому сила $\vec{\mathbf{F}}_2$ (14), ответственная за наведение вращающего момента $\vec{\mathbf{N}}$ (14), продолжает действовать в течение некоторого времени, обеспечивая многократное вращение ротора АТФ-синтазы. Таким образом, ротор АТФ-синтазы можно считать истинным молекулярным мотором.

Реполяризация. Реполяризация, т.е. изменение трансмембранной разности потенциалов на противоположную, $\varphi \rightarrow -\varphi$ сопровождается изменением направления электрического поля $\vec{\mathbf{E}} \rightarrow -\vec{\mathbf{E}}$ между центром С-диска (с закоренной субъединицей γ) и его периферией. Поэтому локальный радиальный ток зарядов также меняет направление на противоположное. $\vec{\mathbf{v}} \rightarrow -\vec{\mathbf{v}}$. Однако магнитное поле обладает инерционностью [16, 17, 23]. В силу инерционности магнитное поле $\vec{\mathbf{B}}$ статора некоторое время продолжает действовать в том же направлении. Изменение направления движения зарядов на противоположное $\vec{\mathbf{v}} \rightarrow -\vec{\mathbf{v}}$ вследствие инверсии электрического поля при неизменном направлении магнитного поля $\vec{\mathbf{B}}$ сопровождается инверсией силы Лоренца, которая начинает действовать в обратном направлении:

$$\vec{\mathbf{F}}_2' = q[-\mathbf{v}\vec{\mathbf{B}}] = -q[\vec{\mathbf{v}}\vec{\mathbf{B}}] \rightarrow \vec{\mathbf{F}}_2' = -\vec{\mathbf{F}}_2. \quad (15)$$

Поэтому вращающий момент также меняет направление на противоположное:

$$\vec{\mathbf{N}}' = -\vec{\mathbf{N}}. \quad (15,а)$$

При этом С-диск, т.е. ротор, а с ним и субъединица γ , также начинают вращаться в обратном направлении.

Частота вращения ротора Na^+ -АТФ-синтазы. Исходя из экспериментальных данных, можно качественно оценить циклическую частоту ω ротора Na^+ -АТФ-синтазы - С-диска и связанной с ним субъединицы γ :

$$\frac{mv^2}{R} = q[|\vec{\mathbf{v}}_r\vec{\mathbf{B}}|] m\omega^2 R = qv_r B; \quad (16)$$

$$\omega R = v \uparrow \rightarrow \omega = \frac{qBv_r}{mv} v = \frac{\omega}{2\pi}; v = \frac{1}{2\pi} \frac{qB}{m} \frac{v_r}{v}, \quad (17)$$

где R – радиус ротора; v_r – скорость зарядов между центром ротора и его периферией; v – линейная скорость вращения зарядов и увлекаемого ими ротора; ω - циклическая частота вращения зарядов ротора и увлекаемого ими самого ротора под действием силы Лоренца; $|\vec{\mathbf{B}}| = B_z$, где B_z – z-составляющая магнитной индукции статора. Полагая $q \approx 1,6 \cdot 10^{-19}$ Кл; $m \approx 9 \cdot 10^{-31}$ кг; $B \approx 10^{-10}$ Тл; $\frac{v_r}{v} \sim 10^2$, получим $v \sim 10^2 \text{ c}^{-1}$

Базальное тельце бактериального жгутика. В базальном тельце жгутиков бактерий происходят во многом схожие процессы с работой АТФ-синтазы [25, 37, 28]. Некоторые морские бактерии, например *Vibrio*, алкалофильный *Bacillus*, *Acetobacterium woodii* и другие используют ионы натрия вместо протонов. Ротор бактериального мотора (MS-диск или кольцо) внутренним (цитоплазматическим) основанием контактирует с цитоплазмой клетки, а остальная часть диска погружена в толщу цитоплазматической мембраны (рис. 2).

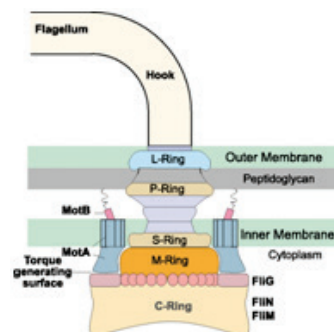


Рисунок 2. Архитектура бактериального жгутика. MotA, Motb - статоры с проходящими внутри ионными каналами простираются от цитоплазмы до пептидогликанового слоя. S-Ring, M-ring - роторы. Они локализованы в цитоплазматической мембране и своей нижней поверхностью соприкасаются с цитоплазмой. В центральной зоне верхней поверхности, локализованной в цитоплазматической мембране, её пронизывает основание жгутика, вдоль большой оси которого проходит канал, соединяющийся с экзоплазмой. Между экзоплазмой и цитоплазмой, а потому и между основанием внутрижгутикового канала и периферией ротора (MS-Ring) существует разность потенциалов и напряжённость электрического поля, в котором на заряды действует сила, сообщающая им радиальное движение – между центром и периферией ротора. Магнитное поле статоров создаёт силу Лоренца, которая инициирует вращающий момент, вызывающий вращение зарядов и вместе с ними - вращение SM - кольца с закоренным в нём бактериальным жгутиком

В отличие от субъединицы γ , которая в FOF1 Na^+ -АТФ-синтазе, вращаясь вместе с С-кольцом ротора, проникает в цитоплазму и проходит через просвет вдоль центральной оси симметрии компартамента F1, бактериальный жгутик выходит из ротора – MS-кольца и попадает во внеклеточную среду – экзоплазму и, вращаясь вместе с ротором, обеспечивает движение бактерии во внешней среде [24-27].

Статор базального тельца бактериального жгутика. Статор бактериального жгутика MotA, MotB – это несколько α -спиральных протеиновых пучков, пронизывающих цитоплазматическую мембрану. Существенно, что их внутренние окончания погружены в цитоплазму, а внешние - находятся в периплазме или экзоплазме. Поэтому пучки из α -спиральных белковых субъединиц, образующих статор, обладают изначальным электрическим дипольным моментом \vec{D}_0 . При внешних воздействиях, вызывающих изменение трансмембранного потенциала, согласно концепции Ходжкина и Хаксли [13], а также экспериментам Безаниллы и Армстронга [14], в белковых α -спиральных субъединицах, ионного канала возникает воротный ток. Как известно, любой ток зарядов создаёт не только электрическое, но и магнитное поле. Как это было показано для Na^+ -АТФ-синтазы, направление магнитного поля воротного тока статора перпендикулярно поверхности цитоплазматической мембраны и определяется аналогично (10). Магнитное поле статора не локально и может влиять на ротор, расположенный в непосредственной близости от статора.

Ротор базального тельца бактериального жгутика. MS- кольцо расположено в цитоплазматической мембране так, что "нижние" участки α -спиральных белковых субъединиц MS-кольца соприкасаются с цитоплазмой, а вся остальная часть пронизывает толщу цитоплазматической мембраны. В центре верхнего основания ротора закорен жгутик, противоположный конец которого выходит во внешнюю среду (рис. 2). Расположение ротора таково, что его периферия через "нижнее" основание оказывается связанной с цитоплазмой, а внешнее окончание жгутика, пересекая цитоплазматическую мембрану, выходит в экзоплазму. Поэтому между центром ротора, где закорен жгутик, и его (ротора) периферией должна существовать разность потенциалов ϕ , совпадающая с трансмембранной и соответственно, напряжённость электрического поля \vec{E} , имеющая радиальное направление:

$$\vec{E} = -\text{grad}\phi, \tag{18}$$

где \vec{E} направлена от центра к периферии. При достаточно большой трансмембранной разности потенциалов создается электрическое поле между центром и периферией ротора, способное индуцировать радиальный ток зарядов в MS-диске, поскольку на каждый заряд в электрическом поле действует сила \vec{F} :

$$\vec{F} = q\vec{E}. \tag{19}$$

Статор базального тельца бактериального жгутикового мотора устроен аналогично статору FOF1 Na^+ -АТФ-синтазы (рис. 1, 2). В обоих случаях воротный ток в α -спиральных субъединицах белковой компоненты ионного канала создаёт магнитное поле. Ротор бактериального жгутика - система MS-колец вместе с основанием жгутика, локализованная в непосредственной близости от статора, попадает в магнитное поле статора. В магнитном поле статора, направленном перпендикулярно радиусу ротора, на радиально движущиеся заряды действует сила Лоренца (12), магнитная составляющая которой перпендикулярна скорости зарядов и магнитному полю. Поэтому создается вращающий момент \vec{N} , действующий на радиально движущиеся заряды:

$$\vec{F} = q[\vec{v}B] \rightarrow \vec{N} = [\vec{R}\vec{F}], \tag{20}$$

где \vec{N} – вращающий момент, действующий на движущиеся заряды; \vec{B} – магнитное поле, индуцируемое статором, \vec{v}_r – радиальная скорость зарядов; \vec{R} – радиус MS-диска. Применяя известные соотношения [17, 21], получим:

$$|\vec{F}| = qv_r B; v = \omega R; F_u = \frac{mv^2}{R} \rightarrow qv_r B = \frac{mv^2}{R}; \omega = \frac{qBv_r}{mv}; v = \omega/2\pi \approx 10^2 c^{-1}, \tag{21}$$

где \vec{B} – индукция магнитного поля статора; \vec{R} – радиус -диска; q, m – соответственно величина заряда и его масса; v_r – скорость заряда вдоль радиуса MS-диска; ω – соответственно циклическая частота вращения заряда в MS-диске. Таким образом, сила Лоренца \vec{F} (12) создаёт вращающий момент \vec{N} (20), действующий на заряды, которые вращаются с циклической частотой ω (21), а поскольку заряды связаны со своими молекулами, то они увлекают во вращение всю систему, включая основание жгутика. Поэтому и жгутик вращается с циклической частотой ω (21) [22-25].

Ионы, переносимые против градиента концентрации в ионных помпах Na^+ -АТФ-синтазы. Ионы Na^+ , H^+ , способные к движению против градиента концентрации в ионном канале АТФ-аз в температурном интервале 0-70 °С гидратируются, в отличие от ионов K^+ , которые вплоть до температуры +70 °С проявляют отрицательную гидратацию, т.е. не способны к формированию гидратной оболочки [26-29]. Гидрокомплекс натрия ($\text{Na}^+ \cdot 2\text{H}_2\text{O}$) имеет слабый электрический заряд вследствие экранировки иона молекулами воды (28), в

то время как K^+ обладает значительным зарядом. $e^+ = 1,6 \cdot 10^{-19}$ Кл. Вместе с тем, и Na^+ , и K^+ – диамагнитные ионы. Учитывая, что и ионы Na^+ , и молекулы воды диамагнитны, в силу аддитивности диамагнитной восприимчивости [30, 31] гидрокомплексы натрия ($Na^+ \cdot 2H_2O$), как и ионов водорода – гидроксония ($H^+ \cdot H_2O$) или ($H^+ \cdot 4H_2O$) обладают гораздо большей (по абсолютной величине) диамагнитной восприимчивостью, чем негидратированные ионы K^+ [32, 33]. Этими различиями электрических и магнитных свойств ионов K^+ по сравнению с ионами Na^+ и H^+ можно объяснить их разное поведение в ионном канале АТФ-азы в режиме активного транспорта. Магнитное поле вихревого тока в k -той α -спиральной субъединице белковой компоненты стенки ионного канала Na^+ , K^+ -АТФ-азы направлено вдоль оси α -спиральной субъединицы, т.е. перпендикулярно цитоплазматической мембране и может быть описано соотношением [12]:

$$\vec{B} = k \frac{N}{l} \vec{J} \vec{n}, \quad (22)$$

где \vec{B} – индукция магнитного поля; N, l – соответственно число витков и длина α -спиральных субъединиц; \vec{J} – вихревой ток; k – коэффициент пропорциональности, зависящий от системы единиц. В системе СИ $k = \mu_0 \mu$; \vec{n} – единичный вектор, направленный вдоль оси α -спирали. В ионных каналах статора внешний портал (устье) в момент открытия приобретает воронкообразную форму, расширяющуюся к выходу в экзоплазму (или межмембранную зону) [4]. Поэтому, согласно законам физики, магнитное поле ослабевает на выходе в экзоплазму. В ионном канале, локализованном между цито- и экзоплазмой, действует одновременно и электрическое, и магнитное поля. В неоднородном магнитном поле на диамагнитные ионы действует выталкивающая сила, направленная в сторону ослабления поля, пропорциональная диамагнитной восприимчивости и градиенту магнитного поля [12, 16, 21] Поэтому суммарная сила здесь складывается из двух составляющих – электрической и магнитной:

$$\vec{F} = q\vec{E} - \chi B_z \frac{\partial B_z}{\partial z}, \quad (23)$$

где χ – диамагнитная восприимчивость иона или гидрокомплекса; B_z – z -составляющая магнитной индукции (ось z направлена вдоль оси ионного канала); \vec{E} – напряжённость электрического поля, связанная с трансмембранной разностью потенциалов:

$$\vec{E} = -\text{grad}\phi \approx -\frac{\phi}{l} \vec{n}. \quad (24)$$

О механизме активного транспорта ионов, осуществляемого АТФ-азами. Обратимся к соотношению Ланжевена для определения магнитной восприимчивости отдельного иона Na^+ и K^+ [31-33] В системе СИ:

$$\chi = \mu_0 \mu \frac{(ze^2)}{m} \sum_i r_i^2, \quad (25)$$

где χ – диамагнитная восприимчивость иона; μ_0 – магнитная постоянная; μ – магнитная проницаемость; Ze – заряд иона; m – масса иона; r_i – средний радиус электрона. Магнитная восприимчивость гидрокомплексов в силу аддитивности магнитной восприимчивости является суммой магнитной восприимчивости иона и гидратной оболочки. Учитывая, что экзоплазматические устья ионных каналов на концах расширяются [4], можно заключить, что вблизи внешнего устья АТФ-азы магнитное поле становится неоднородным и ослабевает. Поэтому на диамагнитные ионы с диамагнитной восприимчивостью χ в ионном канале Na^+ , K^+ -АТФ-азы помимо электрической силы, действует сила неоднородного магнитного поля, направленная в сторону слабого поля [12, 16, 17, 21]:

$$F_m = \chi B_z \frac{\partial B_z}{\partial z}, \quad (26)$$

где B_z – z -составляющая магнитной силы, χ – магнитная восприимчивость иона B_z – z -составляющая магнитной индукции (ось z направлена вдоль оси ионного канала). Таким образом, в активированном ионном канале Na^+ , K^+ -АТФ-азы на ионы действует сила:

$$\vec{F} = \vec{F}_e + \vec{F}_m, \quad (27)$$

где

$$\vec{F}_e = q\vec{E}; \vec{F}_m = \chi B_z \frac{\partial B_z}{\partial z} \vec{n}. \quad (28)$$

Известно, что в системе активного транспорта ионы K^+ (с отрицательной гидратацией) не могут перемещаться против градиента концентрации, в отличие от гидратирующихся ионов H^+ или Na^+ (а также некоторых других). Перечислим некоторые различия между ионами K^+ и Na^+ . (Аналогично этому можно перечислить различия между ионами K^+ и H^+): Na^+ -ионы в водной среде гидратируются ($Na^+ \cdot 2H_2O$), начиная с температуры $\approx 10^\circ C$ в то время как ионы K^+ проявляют отрицательную гидратацию - отталкивают воду (до температуры $\approx 70^\circ C$). Диамагнитная восприимчивость - аддитивная величина и поэтому гидратированные ионы обладает гораздо большей диамагнитной восприимчивостью, чем негидратированные: $|\chi(Na^+ \cdot 2H_2O)| \gg |\chi(K^+)|$. Изменение разности потенциалов между внутренним и внешним устьями ионного канала, согласно известным данным [13, 14], вызывает электрическую поляризацию, сдвиг зарядов вдоль химических связей (появление воротного тока) в α -спиральных субъединицах белковой компоненты ионного канала. Согласно законам электричества, ток зарядов любой природы, независимо от причины, его вызывающей, сопровождается появлением магнитного поля в окружающей среде [12, 16, 21]. Индукция магнитного поля воротного тока, с учётом его конфигурации и локализации, параллельна оси ионного канала и определяется соотношением (10) [18, 19, 23]. Поскольку ионный канал статора АТФ-азы связывает экзоплазму и цитоплазму, т.е. зоны, характеризующиеся различным ионным составом и, следовательно, разностью электрических потенциалов, то в нём создаётся электрическое поле напряжённостью $\vec{E} = -grad\phi$, направленной вдоль оси ионного канала [12, 16, 17, 21]. Внешнее устье ионного канала цитоплазматической FOF1 АТФ-азы расширяется на выходе в экзоплазму [4]. Поэтому магнитное поле воротного тока в ионном канале неоднородно - оно ослабевает в направлении к экзоплазме. В неоднородном магнитном поле на диамагнитные ионы действует сила, пропорциональная диамагнитной восприимчивости, направленная в сторону слабого поля. Таким образом, на положительно - заряженные диамагнитные ионы в каналах системы активного транспорта Na^+ , K^+ -АТФ-азы электрическая составляющая $q\vec{E}$ силы (23) оказывается направленной в сторону цитоплазмы, в то время как магнитная составляющая ориентирована противоположно - в сторону экзоплазмы. Поскольку ионы K^+ и гидрокомплексы Na^+ различаются электрическими и магнитными свойствами, то в ионном канале на них по - разному действуют электрическое и магнитное поля. Движение гидратированных диамагнитных ионов Na^+ против градиента концентрации в экзоплазму в системе активного транспорта Na^+ , K^+ -АТФ-азы может быть обусловлено тем, что магнитная составляющая силы (23) превосходит по величине противоположно направленную электрическую составляющую, в то время как ионы K^+ , в силу их свойства отрицательной гидратации испытывают сильное действие электрической составляющей, превосходящей магнитную, поэтому они движутся в цитоплазму.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

1. Согласно законам биоэнергетики, в истинных молекулярных моторах происходит преобразование энергии от внешних источников в промежуточные виды, используемые клетками для совершения работы. Мы рассмотрели возможный механизм этого процесса на конкретном примере - вращения ротора *Propionigenium modestum* и *Liobacter tartaricus*, а также вращения бактериальных жгутиков.

2. Высказывается предположение, что вращение ротора FOF1 Na^+ , K^+ -АТФ-синтазы обусловлено вращающим моментом, инициируемым силой Лоренца, магнитная составляющая которой создаётся магнитным полем статора. Многократность вращения без дополнительных источников энергии обеспечивается тем, что вращающий момент не уменьшается в течение времени, пока действуют внешние факторы.

3. Активный транспорт ионов H^+ или Na^+ , осуществляемый соответствующими АТФ-азами, обусловлен совокупностью нескольких факторов, из которых важнейшими являются: гидратация иона Na^+ , образующего комплексы ($Na^+ \cdot 2H_2O$), так и иона H^+ , образующий в водном окружении гидроксоний - ($H^+ \cdot H_2O$) или ($H^+ \cdot 4H_2O$). Гидрокомплексы ионов обладают более сильным диамагнетизмом, чем свободные ионы благодаря свойству аддитивности диамагнитной восприимчивости. Одновременно с этим, при гидратации происходит экранировка электрического заряда иона. Совокупность этих факторов приводит к снижению влияния электрического поля и вместе с тем, - к усилению выталкивающего действия неоднородного магнитного поля на гидрокомплекс иона в ионном канале. Ионы K^+ проявляют отрицательную гидратацию, вследствие чего они в водном окружении не гидратируются. Поэтому они сохраняют свой электрический заряд (незанированный) и вследствие отрицательной гидратации обладают слабым диамагнетизмом. Это приводит к тому, что электрическая составляющая силы (23) на них действует сильнее, чем магнитная составляющая, и они могут двигаться только в цитоплазму. Выход ионов натрия (или протонов) в экзоплазму, т.е. их движение против градиента концентрации обеспечивает увеличение трансмембранного потенциала, что приводит к восстановлению энергетического баланса клетки и вместе с тем свидетельствует о существовании равноправности протонной и натриевой биоэнергетики.

Список литературы / References:

1. Скулачев В.П. Законы биоэнергетики. СОЖ, МГУ им. Ломоносова, 1997, т. 01, с. 9-14. [Skulachov V.P. Bioenergetics laws. SOJ, MSU of Lomonosov, 1997, vol. 01, pp. 9-14. (In Russ.)]
2. Романовский Ю.М., Тихонов А.Н. Молекулярные преобразователи энергии живой клетки. Протонная АТФ-аза - вращающийся молекулярный мотор. УФН, 2010, т. 180, с. 931-956. [Romanovskiy Yu.M.,

- Tikhonov A.N. Molecular energy converters of living cells. Proton ATP-ase – a rotating molecular motor. *UFN*, 2010, vol. 180, pp. 931-956. (In Russ.)]
3. Kinosita K., Yasuda J.R., Noji H., Adachi K. A rotary molecular motor that can work at near 100% efficiency. *Philos. Trans R. Soc. Lond. B. Biol. Sci.*, 2000, vol. 355(1396), pp. 473-489.
 4. Castillo J.P., Rui H., Basilio D., Das A., Roux B., Latorre R., Bezanilla F., Holmgren M. *Mechanism of potassium ion uptake by the Na(+)/K(+)-ATPase*. *Nat Commun.*, 2015, vol. 6, p. 7622.
 5. Скулачев В.П. *Биоэнергетика. Мембранные преобразователи энергии*. М.: Высш. шк., 1989, 270 с. [Skulachev V.P. *Bioenergetics. Membrane energy converters*. Moscow: Visshaya shkola, 1989, 270 p. (In Russ.)]
 6. Kaim G. The Na⁺-translocating F₁F₀ ATP synthase of *Propionigenium modestum*: mechanochemical insights into the F₀ motor that drives ATP synthesis. *Biochimica et Biophysica Acta (BBA)*, 2001, vol. 1505, iss. 1, pp. 94-107.
 7. Hakulinen J.K., Klyszeiko A.L., Hoffmann J., Eckardt-Strelau L. [et al.] Structural study on the architecture of the bacterial ATP synthase F motor. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, 2012, vol. 109(30), pp. 357-359.
 8. Альтшулер С.А., Козырев Б.М. *Электронный парамагнитный резонанс*. М.: Наука, 1961, 672 с. [Altshuler S.A., Kozyrev B.M. *Electron paramagnetic resonance*. Moscow: Nauka, 1961, 672 p. (In Russ.)]
 9. Сликтер Ч. *Основы теории магнитного резонанса*. М.: Мир, 1981, 448 с. [Slikter C. *Bases of magnetic resonance theory*. Moscow: Mir, 1989, 448 p. (In Russ.)]
 10. Шестакова А.Н., Буторина А.В., Осадчий А.Е. Магнитоэнцефалография – новейший метод функционального картирования мозга человека. *Ж. экспериментальной психологии*, 2012, т. 5, № 2, с. 119-134. [Shestakova A.N., Butorina A.V., Osadchiy A.E. Magnetoencephalography - the newest method of functional mapping of the human brain. *J. of experimental psychology*, 2012, vol. 5, no. 2, pp. 119-134. (In Russ.)]
 11. Введенский В.Л., Ожогин В.И. *Сверхчувствительная магнитометрия*. М.: Наука, 1986, 199 с. [Vvedenskiy V.L., Ojogin V.I. *Supersensitive magnetometry*. Moscow: Nauka, 1986, 199 p. (In Russ.)]
 12. Парселл Э. *Электричество и магнетизм*. М.: Наука, 1965, 444 с. [Parcel E. *Electricity and magnetism*. Moscow: Nauka, 1965, 444 p. (In Russ.)]
 13. Hodgkin A.L., Huxley F.A. A quantitative description of membrane current and its application to conduction and excitation in nerve. *J. Physiology*, 1974, vol. 117, no. 4, pp. 500-544.
 14. Bezanilla F., Armstrong C.M. Inactivation of the sodium channel. Sodium current experiments. *J. Gen Physiol.*, 1977, vol. 70(5), pp. 549-66.
 15. Давыдов А.С. *Биология и квантовая механика*, М.: Наука, 1979, 296 с. [Davydov A.S. *Biology and quantum mechanics*. Moscow: Nauka, 1979, 296 p. (In Russ.)]
 16. Матвеев А.Н. *Электричество и магнетизм*. Лань, 2010, 464 с. [Matveyev A.N. *Electricity and magnetism*. Lan', 2010, 464 p.]
 17. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. *Электродинамика сплошных сред*. М.: Наука, 1982, 621 с. [Landau L.D., Lifshits E.M. *Electrodynamics of Continuous Media*. Moscow: Nauka, 1982, 621 p. (In Russ.)]
 18. Malvankar N.S., Yalcin S.E., Tuominen M.T., Lovley D.R. Visualization of charge propagation along individual pili proteins using ambient electrostatic force microscopy. *Nature Nanotechnology Letters*, 2014, vol. 9, pp. 1012-1017.
 19. Waleed S.M., Jamal D.M., Starikov E.B., Cuniberti G. Electrical conductance in biological molecules. *Adv.Funct. Mater.*, 2010, pp. 1865-1883.
 20. Васильева-Вашакмадзе Н.С. О внутренней взаимосвязи между аллостерическим, мезомерным и индуктивным эффектами в α-спиральных белковых комплексах. *V Съезд Биофизиков России. Материалы*, 2015, т. 1, № 73, с. 153-156. [Vasilieva-Vashkamadze N.S. On the internal relationship between allosteric, mesomeric and inductive effects in α-helical protein complexes. *V Congress of Biophysicists of Russia. Materials*, 2015, vol. 1, no. 73, pp. 153-156. (In Russ.)]
 21. Сивухин Д.В. *Общий курс физики. III т.* М.: Наука, 1977, 704 с. [Sivuhin D.V. *General course of physics. Vol. III*. Moscow: Science, 1977, 704 p. (In Russ.,)]
 22. Вихардполь Р. *Учение об электричестве*. М.: Физматгиз., 1962, 316 с. [Vihardpol R. *The study of electricity*. Moscow: Physmathgis., 1962, 316 p. (In Russ.)]
 23. Скулачев В.П. Электродвигатель бактерий. *СОЖ*, 1996, т. 9, с. 2-7. [Skulachov V.P. Bacterial electroengine. *SOJ*, 1996, vol. 9, pp. 2-7. [In Russ.]]
 24. Renui L. Stepwise formation of the bacterial flagellar system. *PNAS*, 2017, vol. 104, no. 17, pp. 7116-7121,
 25. Omoto C.K., Gibbons I.R., Kamiya D.R. Rotation of the Central Pair Microtubules in Eucaryotic Flagella. *Molec. Biology of the Cell.*, 1999, vol. 10, pp. 14-44.
 26. Романовский Ю.М., Тихонов А.Н. Молекулярные преобразователи энергии живой клетки. Протонная АТФ-аза – вращающийся молекулярный мотор. *УФН*, 2010, т. 180, с. 931-956. [Romanovskiy Yu. M., Tikhonov A.N. Molecular energy converters of living cells. Proton ATP-ase is a rotating molecular motor. *UFN*, 2010, vol. 180, pp. 931-956. (In Russ.)]
 27. Jensen R.B., Wang C.C., Shapiro L. Dynamic localization of proteins and due during a bacterial cell cycle. *Nature Reviews Molecular Cell Biology*, 2002, vol. 3, pp. 167-176.
 28. Эрдеи-Груз Т.Н. *Явления переноса в водных растворах*, М.: Мир, 1976, 597 с. [Erdei-Hruz T.H. *Phenomena of transition in aquatic solution*. Moscow: Mir, 1976, 597 p. (In Russ.)]
 29. Прохоров А.М. *Энциклопедический словарь по физике*. М.: Сов. энциклопедия, 1983, 944 с. [Prokhorov A.M. *Encyclopedic vocabulary on physics*. Moscow: Soviet encyclopedia, 1983, 944 p. (In Russ.)]

30. Киттель Ч. *Физика твёрдого тела*. М.: Наука, 1967, 615 с. [Kittle C. *Physics of solid state*. Moscow: Nauka, 1967, 615 p. (In Russ.)]
31. Измаилов П.А. *Электрохимия растворов*. М.: Хим., 1976, 468 с. [Izmailov P.A. *Electrochemistry of solution*. Moscow: Chem., 1976, 468 p. (In Russ.)]
32. *Краткий справочник физико-химических величин*. Л.: Химия, ред. К.П. Мищенко, А.А. Равдель, 1987, 200 с. [*A brief reference book of physical and chemical quantities*. Leningrad: Chemistry, ed. K.P. Mishchenko, A.A. Ravdel, 1987, 200 p. (In Russ.)]
33. Желиговская Н.Н., Черняев И.И. *Химия координационных соединений*. М.: Высш. шк., 1966, 387 с. [Jeligovskaya N.N., Chernyaev I.I. *Chemistry of coordinating substances*. Moscow: Vysshaya shkola, 1966, 387 p. (In Russ.)]

ABOUT MECHANISM OF MOTOR ROTATION OF FOF1 Na⁺-ATP SYNTHAZIS, BACTERIAL MOTOR AND MECHANISM ION PUMP OPERATION

Vasilieva-Vashakmadze N.S.

Engineering academy of Georgia

M. Kostava str., 77, building 8, Tbilisi, 10175, Georgia; e-mail: engacad@mail.ru, nonavas@rambler.ru

Abstract. In this paper, we propose a possible mechanism for the rotation of the molecular rotor by the example of FOF1 Na⁺-ATP-synthase *Propionigenium modestum*, the mechanism of the torque of bacterial flagella, and the work of the ion pump. It is shown that the mechanism of rotation of molecular rotors, the transfer of ions against the concentration gradient, is the same for both proton and sodium bioenergetics.

Key words: *mechanism of molecular motors, the rotational torque of the ATP-synthase- rotor, the torque of the basal bodies of bacterial flagella, the mechanism of active ion transport.*