

ЭКОМАТМОД-2013
Пушино-на-Оке, 22 октября, 2013г.

**НОВЫЙ ШАГ В МОДЕЛИРОВАНИИ МИКРОБНЫХ
СООБЩЕСТВ: ОЦЕНКА ИЗМЕНЕНИЙ СООТНОШЕНИЯ
СТАБИЛЬНЫХ ИЗОТОПОВ В СУБСТРАТЕ, ПРОДУКТЕ И
БИОМАССЕ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ МЕТАБОЛИЧЕСКИХ
ПУТЕЙ**

В. А. Вавилин

Институт водных проблем РАН

<http://www.laser.ru/vavilin/cc/vavilin.html>

Содержание

- Общее утверждение
- Уравнение, описывающее динамику перераспределения изотопов в продукте, субстрате реакции и биомассе
- Изменение вклада ацетокластического и неацетокластического метаногенеза в ходе анаэробного разложения целлюлозы (^{13}C)
- Перераспределение содержания изотопов в ходе окисления и образования метана (^{13}C и ^2H)
- Динамика анаэробного окисления метана нитритом (^{13}C и ^2H)
- Неканонический путь метанизации целлюлозы в болотах (^{13}C)
- Возрастание роли неацетокластического метаногенеза при увеличении концентрации аммония (^{13}C)
- Денитрификация в почве (^{15}N и ^{18}O)
- Рост фитопланктона на N-субстратах: перераспределение изотопов азота (^{15}N)

- Для описания кинетического изотопного эффекта традиционно предполагается химическая кинетика 1-го порядка по концентрации субстрата (S), где кинетический коэффициент меньше у субстрата с тяжелым изотопом
- Нами утверждается, что динамика фракционирования (разделения) стабильных изотопов является следствием биологической динамики, которая лишь в исключительных случаях может следовать простой кинетике 1-го порядка. Часто для описания биологической динамики можно использовать эмпирическую модель Моно, которая формально близка известной теоретической модели ферментативной кинетики Михаэлиса-Ментен. Таким образом, традиционные экологические модели могут быть дополнены динамическими уравнениями для изотопов

Модель Моно, описывающая рост биомассы B и утилизацию субстрата S с поправкой на прекращение роста при пороговой концентрации S_{cr}

$$\frac{dB}{dt} = \mu_m B \frac{S - S_{cr}}{k_S + S - S_{cr}},$$
$$\frac{dS}{dt} = -\frac{\mu_m}{Y} B \frac{S - S_{cr}}{k_S + S - S_{cr}},$$

μ_m = максимальная удельная скорость роста биомассы; k_S = константа полу-насыщения для субстрата; Y = экономический коэффициент

Уравнение, описывающее разделение (фракционирование) тяжелого и легкого изотопов в ходе биологических процессов

$$\frac{df_P^h}{dt} = \frac{1}{P} \frac{d^h P}{dt} - \frac{^h P}{P^2} \frac{dP}{dt} = \frac{dP/dt}{P} \left\{ \frac{d^h P/dt}{dP/dt} - f_P^h \right\} \approx \frac{dP/dt}{P} \left(\frac{1}{\alpha} f_S^h - f_P^h \right)$$

$f_S^h = ^h S / S$, $f_P^h = ^h P / P$ - фракция тяжелого изотопа в субстрате (S) и продукте (P)

dP/dt - скорость образования продукта

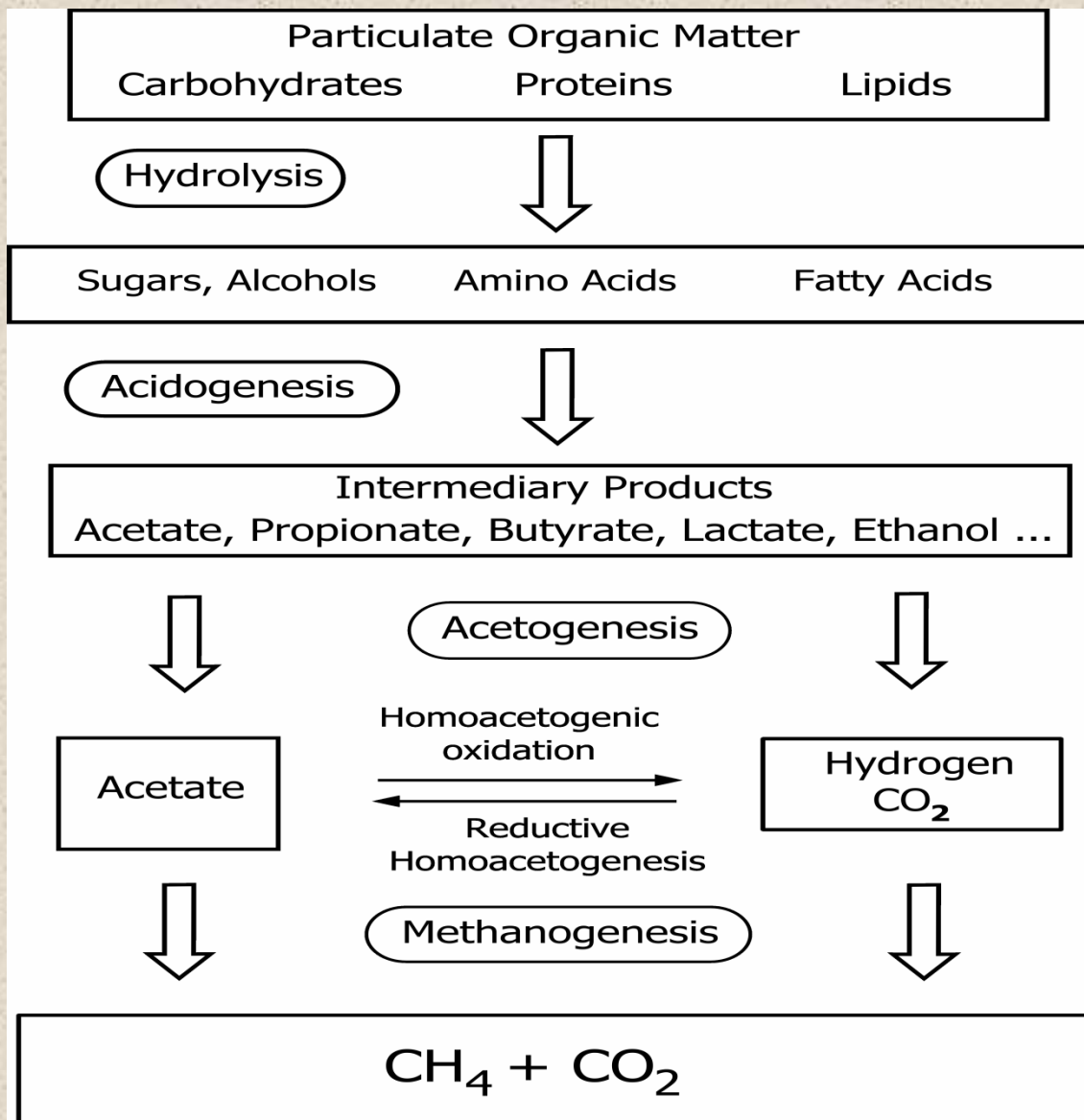
α - коэффициент фракционирования тяжелого и легкого изотопов

Идет предпочтительное образование продукта с легким изотопом. Для описания обогащения субстрата тяжелым изотопом необходимо рассматривать баланс тяжелого изотопа в субстрате, продукте и биомассе

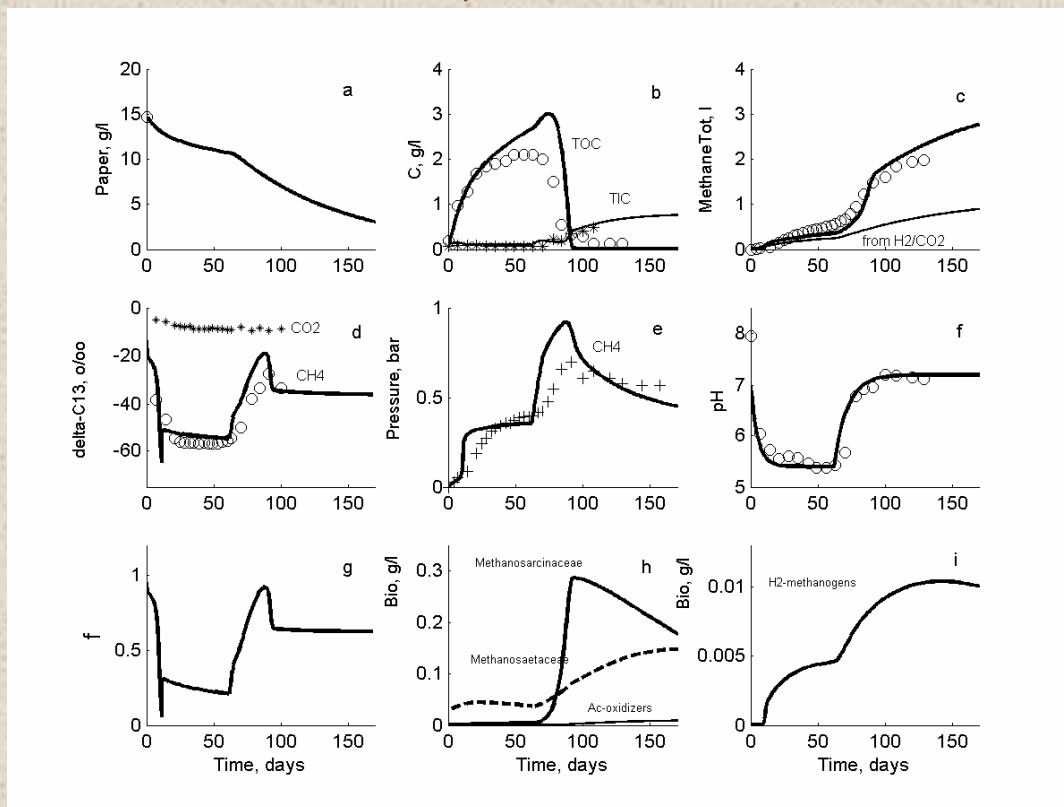
В природе величина отношения тяжелого и легкого стабильных изотопов ($^{heavy}E$, $^{light}E$) составляет малую величину и в этом случае она традиционно вычисляется при помощи величин “приращения”, которые выражаются в промилях разницы от стандарта

$$\delta^{heavy} E(o / oo) = \left[\frac{(^{heavy} E / ^{light} E)_{sample}}{(^{heavy} E / ^{light} E)_{standard}} - 1 \right] \times 1000$$

Схема разложения сложного органического вещества

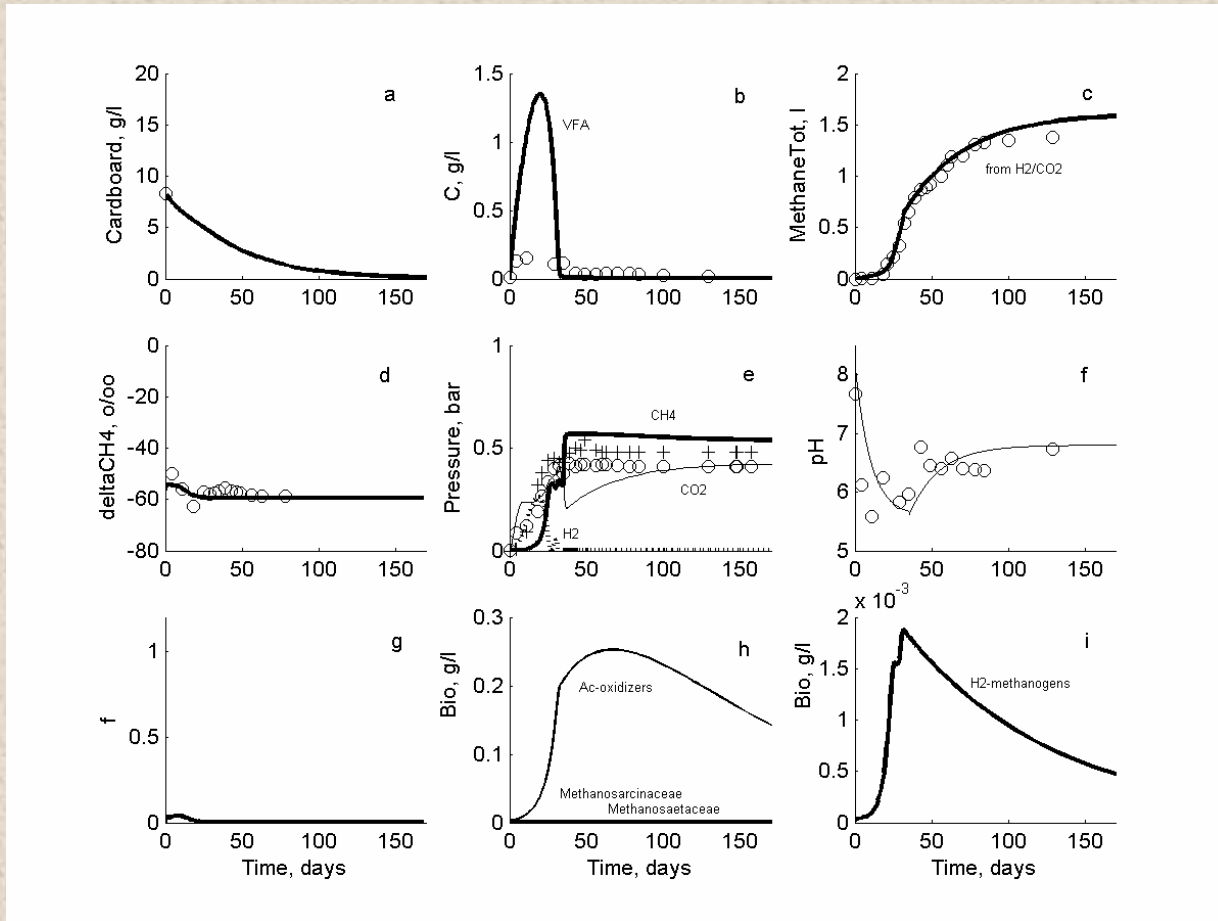


Динамика разложения целлюлозы в мезофильных условиях, где определяющую роль играет соотношение скоростей ацетокластического и водородотрофного метаногенеза (данные: Qu et al., 2009; модель: Vavilin, 2012)



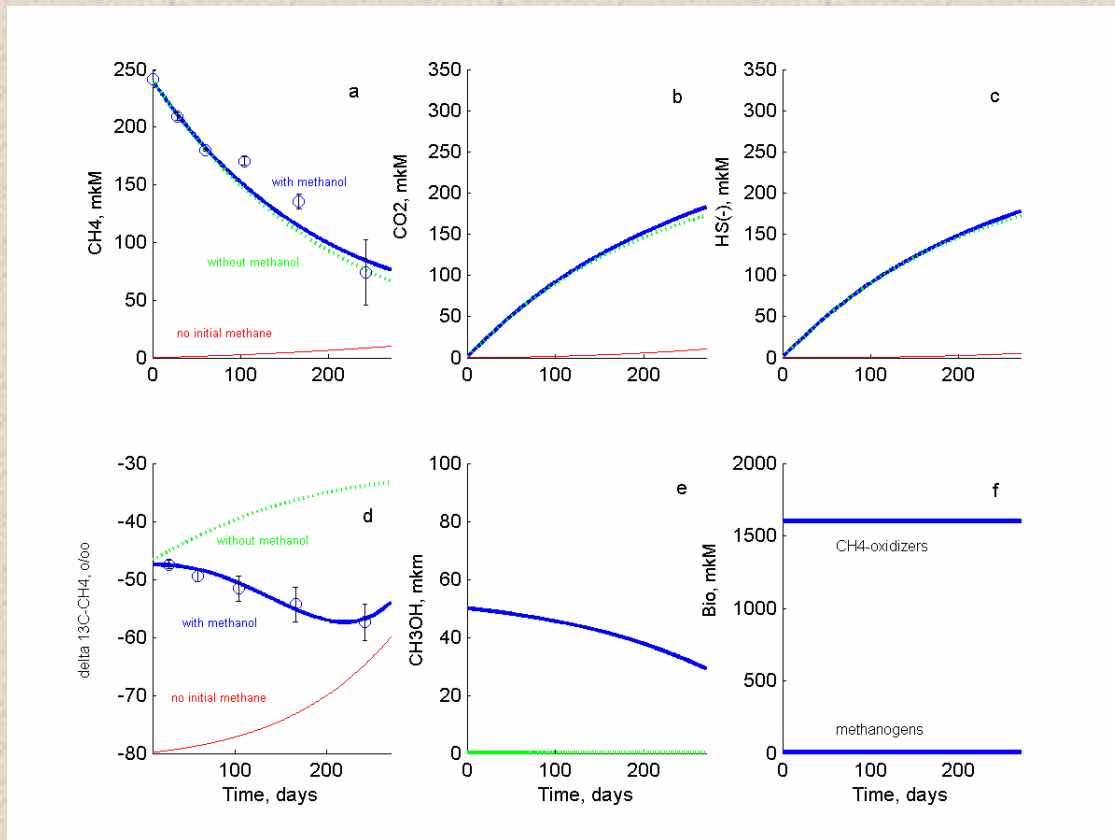
f – относительная скорость ацетикластического метаногенеза. Видно, что динамика $\delta^{13}\text{C}_{\text{CH}_4}$ подобна динамике **f**, а содержание ^{13}C в метане много ниже чем в CO_2 из-за фракционирования изотопов

Динамика разложения целлюлозы в термофильных условиях, где доминирующую роль играет водородотрофный метаногенез (данные: Qu et al., 2009)



f – относительная скорость ацетикластического метаногенеза. Метан образуется только из H_2/CO_2

Динамика анаэробного окисления метана совместно с его продукцией из метанола. Идет реакция 1-го порядка по концентрации метана



данные:

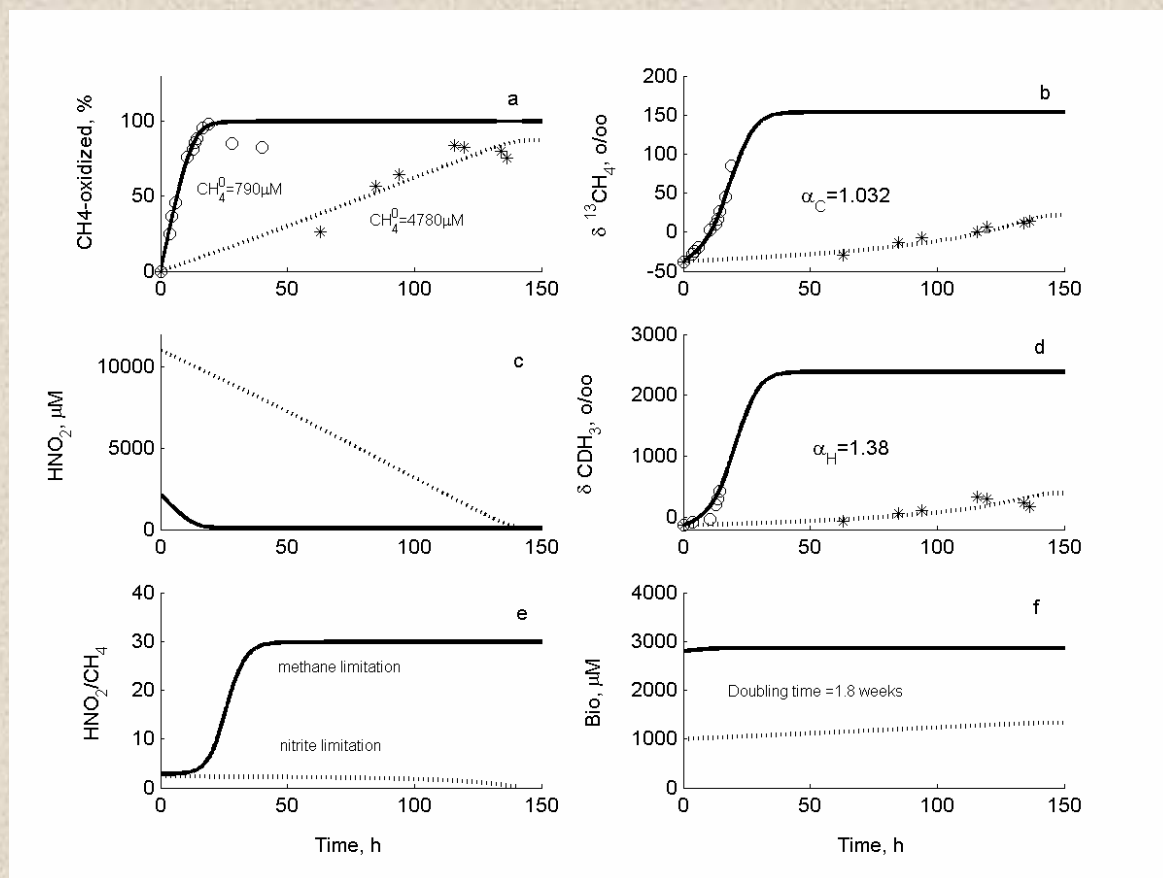
Seifert et al., 2006

модель:

Vavilin, 2013

Небольшая добавка метанола существенно изменяет динамику 'δ¹³C'

Динамика анаэробного окисления метана нитритом



данные:

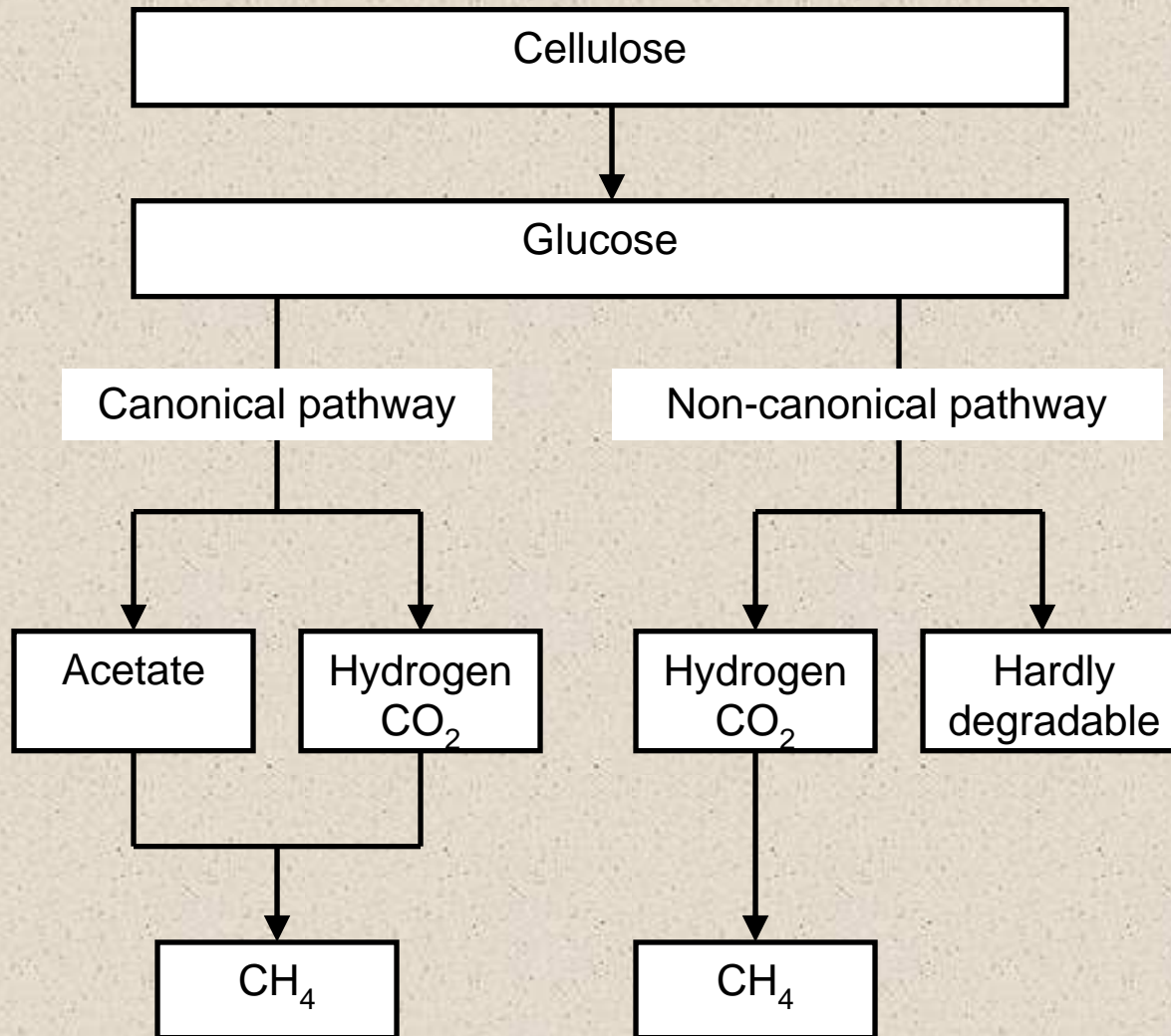
Rasigraf et al., 2012

модель:

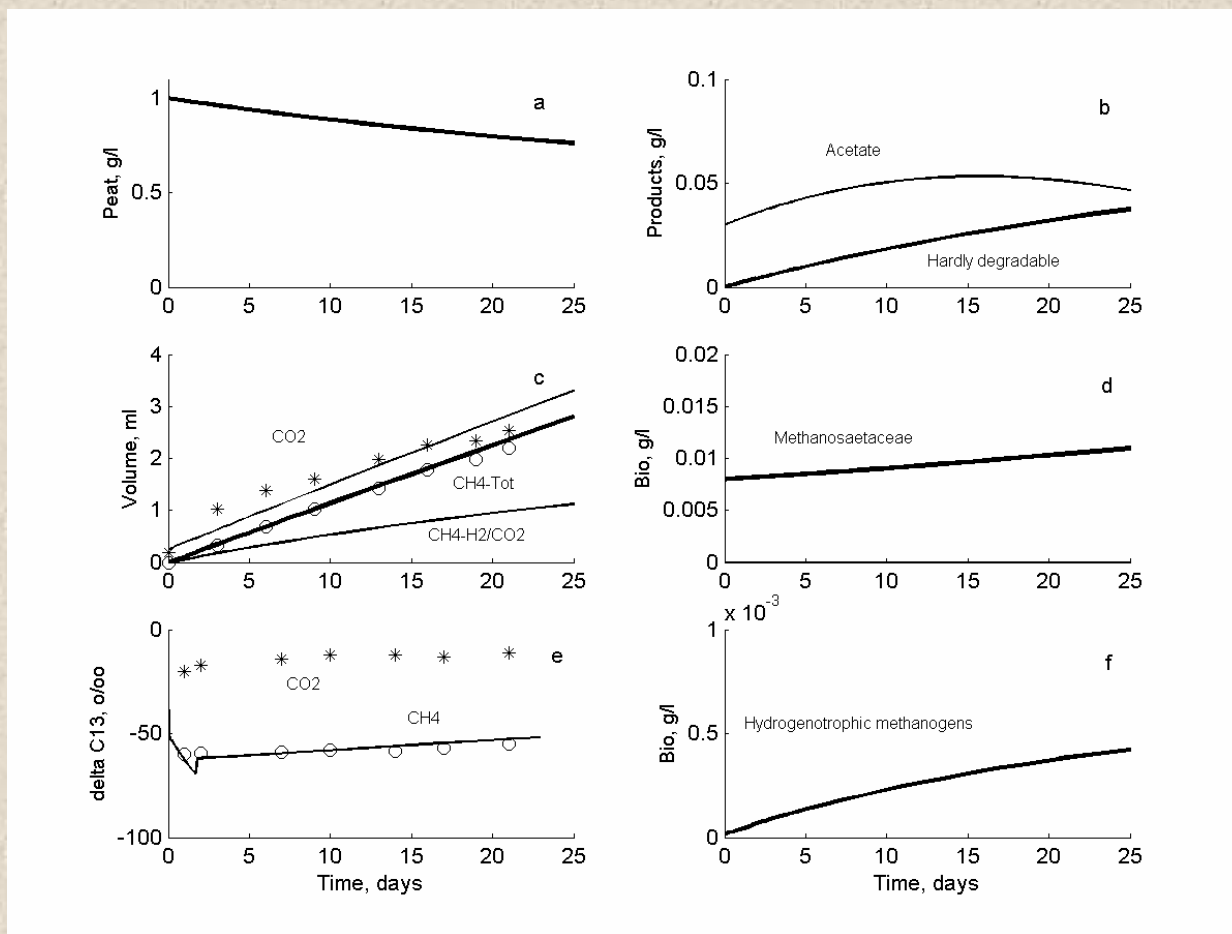
Vavilin, Rytov, online

Динамика фракционирования для изотопов углерода и водорода сильно зависит от лимитирующего субстрата (метана или нитрита)

Канонический и неканонический путь образования метана в болотах



Мезофильное низовое болото с высокой продукцией метана



данные:

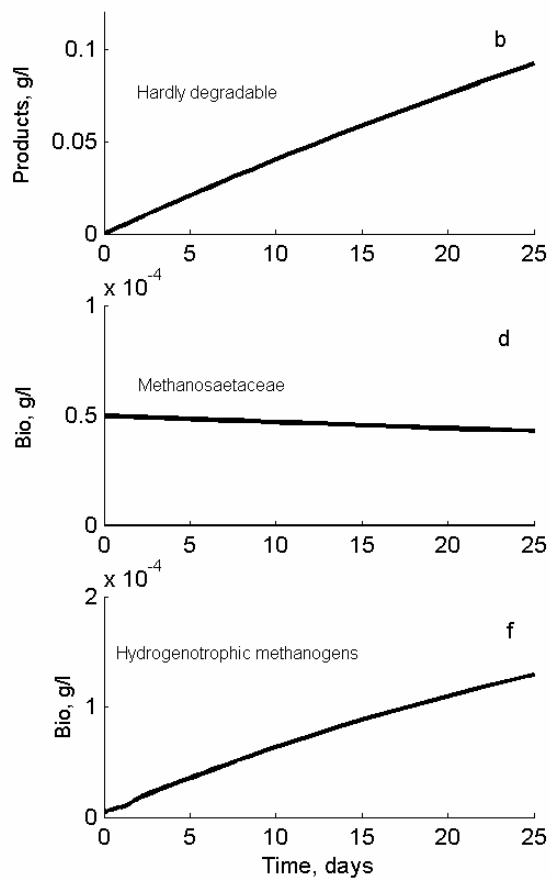
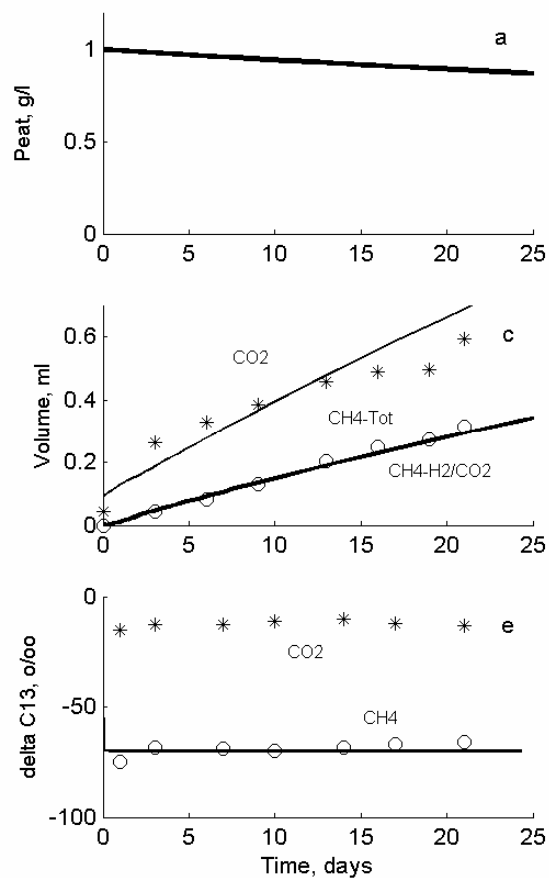
Galand et al., 2010

модель:

Vavilin, 2012

Идет ацетокластический и водородотрофный метаногенез

Верховое сфагновое болото с низкой продукцией метана



данные:
Galand et al., 2010

модель:
Vavilin, 2012

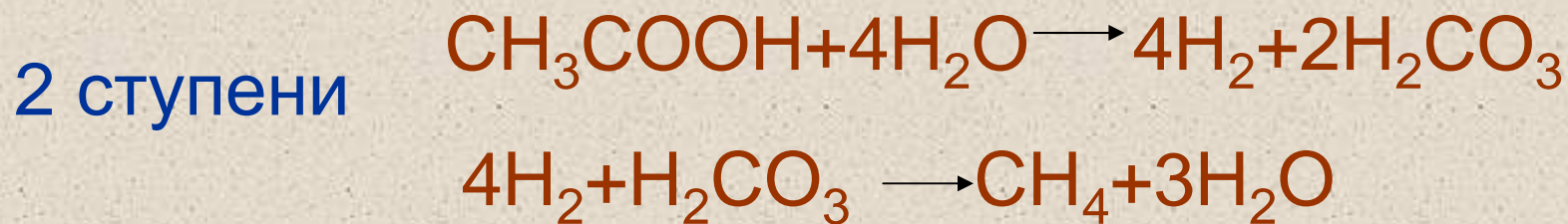
Идет исключительно водородотрофный метаногенез

Два метаболических пути метанизации ацетата

Pathway 1: Ацетикластический метаногенез

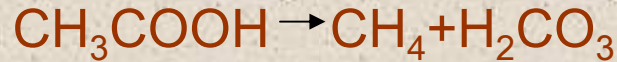


Pathway 2: Синтрофное окисление ацетата



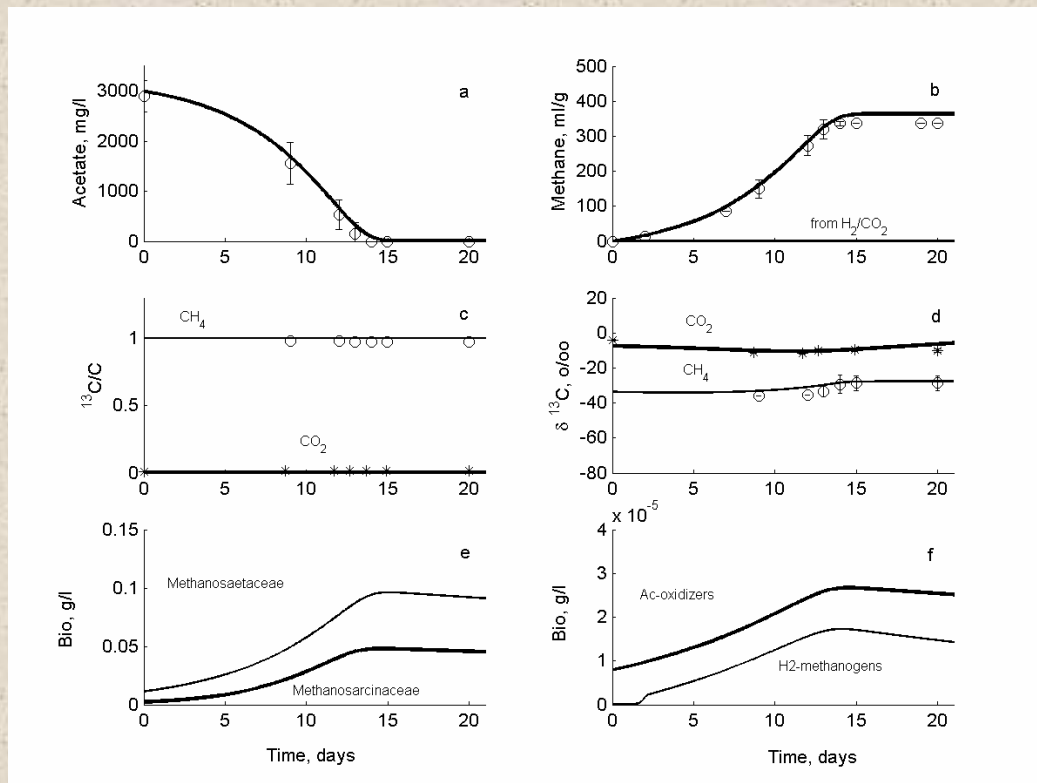
Низкая концентрации аммония 0.18 г/л

(слева 'c'): превращение меченого ацетата (100% ^{13}C в метильной группе CH_3) в метан
(справа 'd'): превращение природного ацетата в метан



Две группы ацетикластических метаногенов *Methanosarcinaceae* и *Methanosaetaceae* конкурировали за ацетат. Весь метан образуется непосредственно из ацетата.

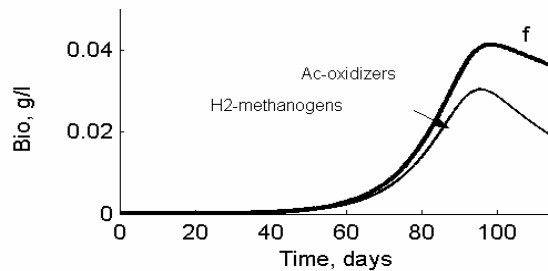
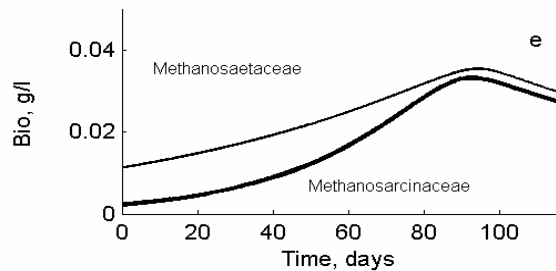
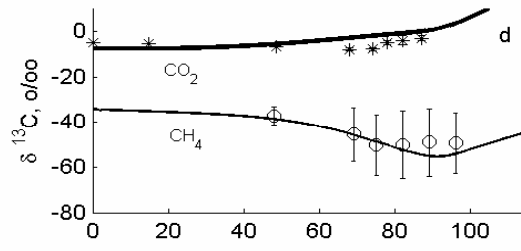
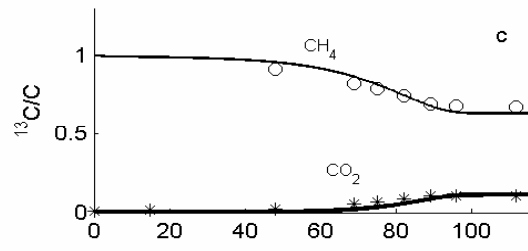
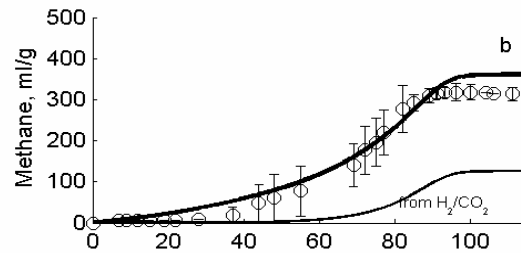
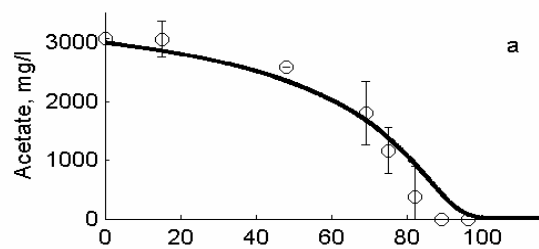
Концентрация водородотрофных метаногенов и ацетат-окисляющих бактерий пренебрежимо мала. Одинаковые кинетические коэффициенты использованы в рисунках 'c, e,' и 'd, f,'



Данные: Grossin-Debattista, 2011; Модель: Vavilin, 2013

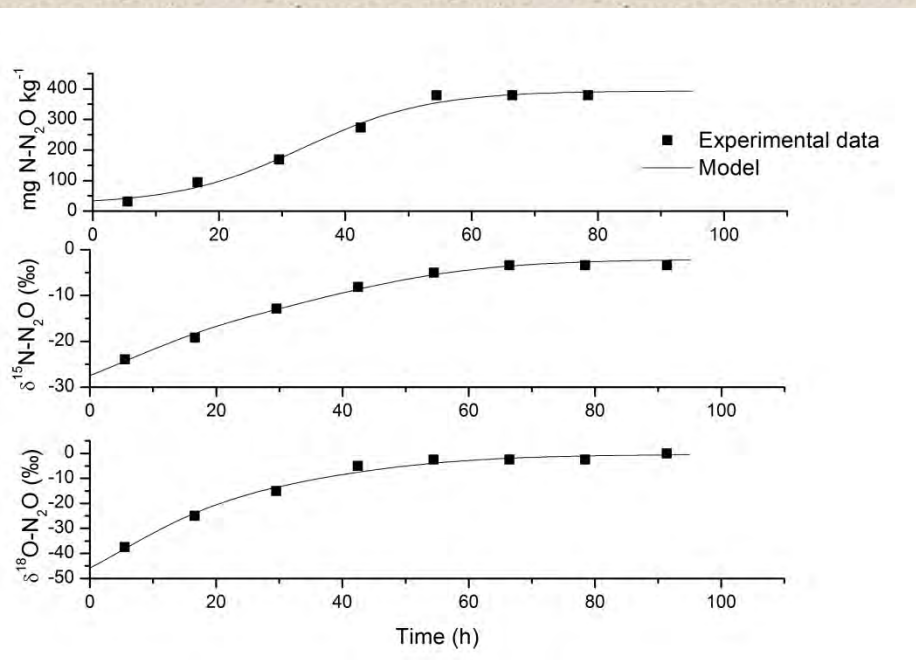
Динамика превращения ацетата в метан при высокой концентрации аммония 3.6г/л. Принимают участие четыре группы микроорганизмов (ацетикластические метаногены *Methanosarcinaceae*, *Methanosaetaceae*, водородотрофные метаногены и ацетат-окисляющие бактерии)

Метан сначала образуется только из ацетата и далее частично из угольной кислоты. Поэтому соотношение $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ в метане снижается

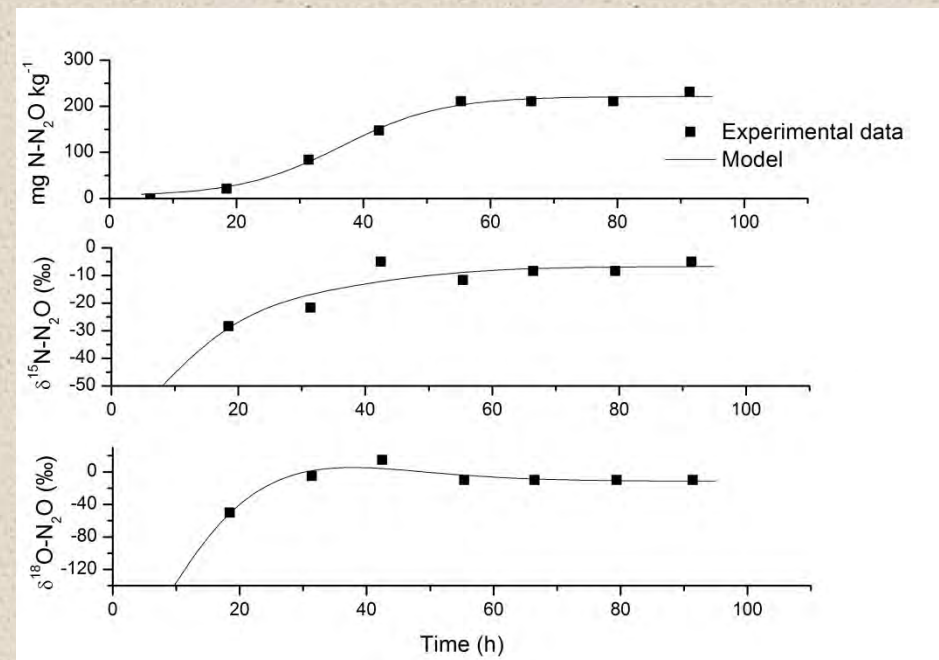


Данные:
Grossin-Debattista, 2011
Модель:
Vavilin, 2013

Поступающая в атмосферу из почвы закись азота является одним из основных парниковых газов. В ходе денитрификации процессу превращения нитрата в закись азота соответствует следующая реакция:



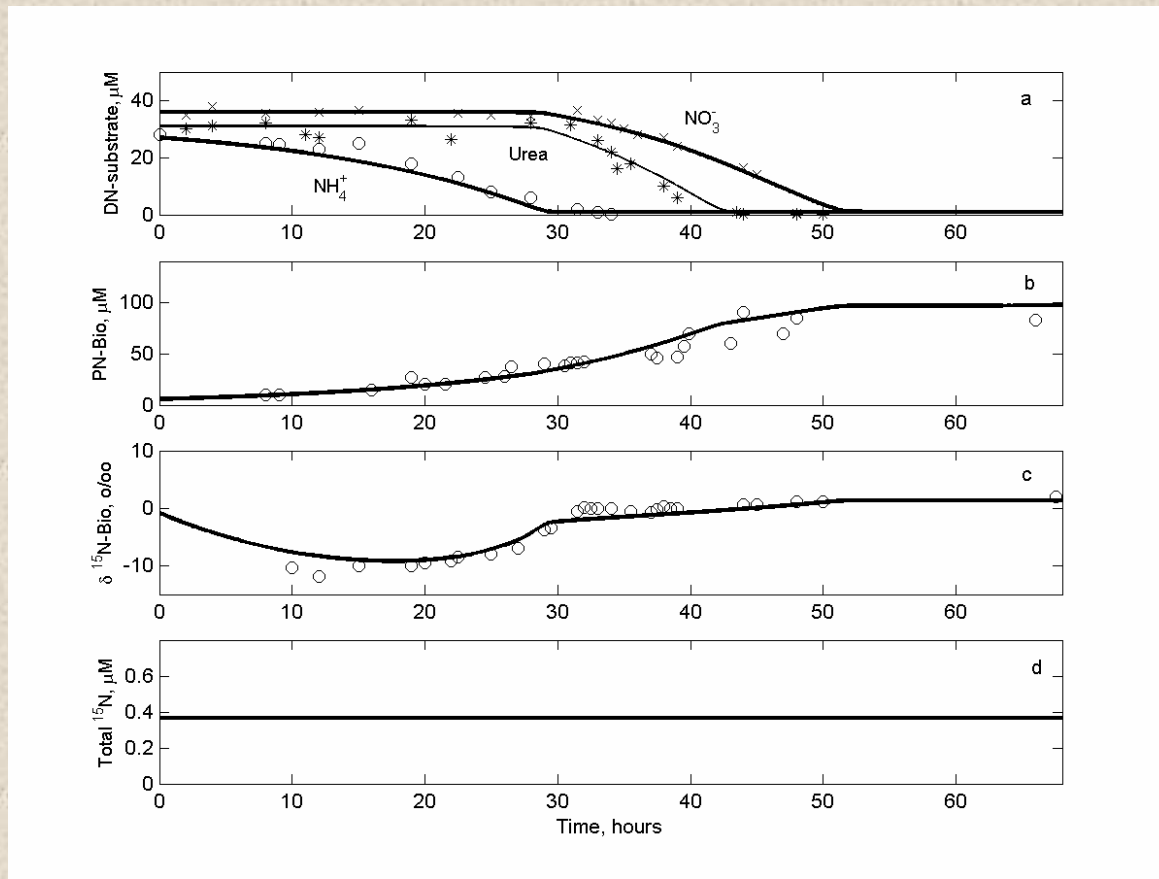
почва под лиственницей



почва под березой

Данные: Menyailo and Hungate, 2006; Модель: Lokshina and Vavilin, submitted

Динамика роста фитопланктона *Thalassiosira pseudonana* на смеси N-субстратов
Потребление нитрата и мочевины идет только после истощения аммония из-за их ингибирования аммонием. Динамика фракционирования изотопов является следствием биологической динамики. Основное фракционирование изотопов идет в ходе потребления аммония



Данные: Waser et al., 1998; модель: Vavilin, submitted

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Применение изотопных методов позволяет определить ключевые стадии функционирования экологических систем

Динамика фракционирования стабильных изотопов является следствием биологической динамики

Благодарю за внимание