

Bioinformatika III

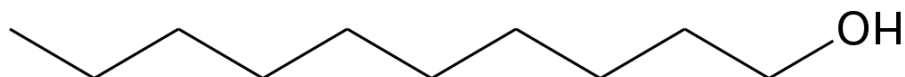
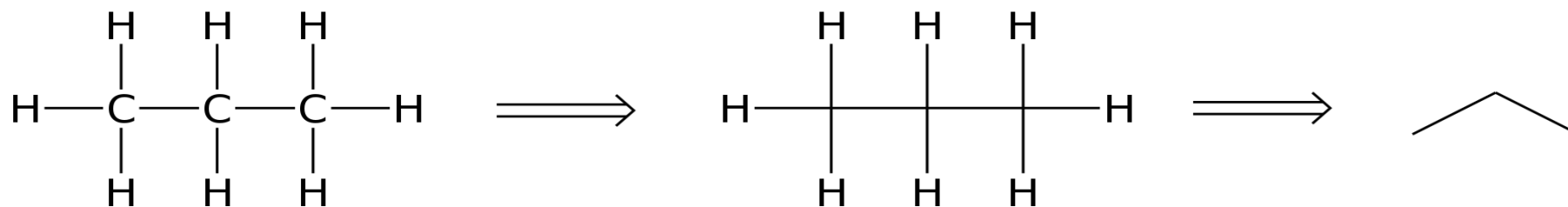
Trimačių struktūrų analizė ir spėjimas

Paskaita 6 – biochemijos pagrindų
pakartojimas

Saulius Gražulis
2021 m.

Chemines formulēs

Organinēs chemijas formulēs angļies atomi pakeičiami līniju sujungimo taškais, o vandenilio atomi nevaizduojami:



Funkcinės grupės

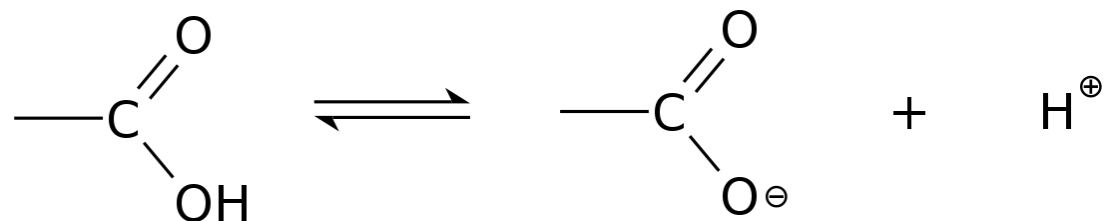
Formulė	Pavadinimas	Junginiai	Savybės
—OH	hidroksilas	alkoholiai	sunkiai disocijuoja
—NH_2	amino-	aminai (pirminiai)	bazinės
$\begin{array}{c} \text{O} \\ \parallel \\ \text{—C} \\ \backslash \\ \text{OH} \end{array}$	karboksilas	organinės rūgštys	rūgštinės
$\begin{array}{c} \text{O} \\ \parallel \\ \text{—C} \\ \backslash \\ \text{NH}_2 \end{array}$	amido-	amidai	labai silpnos bazės, praktiškai neprisijungia protono
$\begin{array}{c} \text{O} \\ \parallel \\ \text{—C} \\ \backslash \\ \text{N—} \\ \\ \text{H} \end{array}$		antriniai amidai, peptidai	

Funkcinės grupės (tesinys)

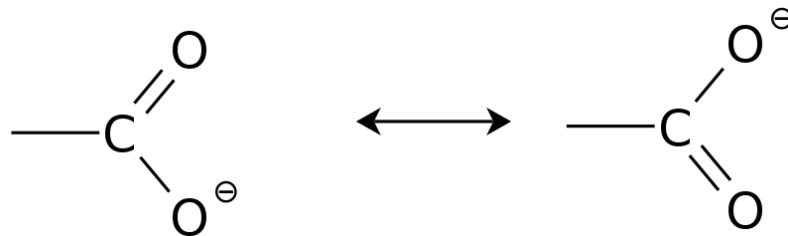
Formulė	Pavadinimas	Junginiai	Savybės
—SH	tolis, sulfhidrilo grupė	tioalkoholiai, merkaptanai	sunkiai disocijuoja, bet lengvai oksiduojama
	guanidino-	guanidino dariniai	bazinės
	imino-	iminai	
	antrinė amino-	antriniai aminai	bazinės
	amino (imino) rūgštis prolinas (Pro)		

Organinių rūgščių savybės

Vandens terpėje organinės rūgštys disocijuoja:

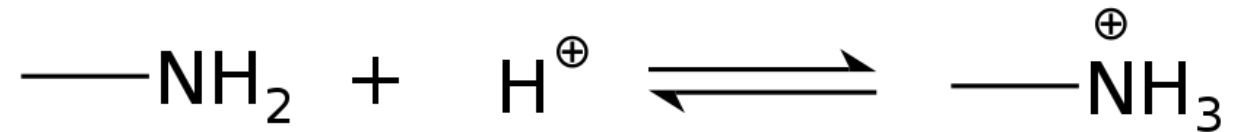


Karboksilato jonas turi rezonansinę struktūrą:

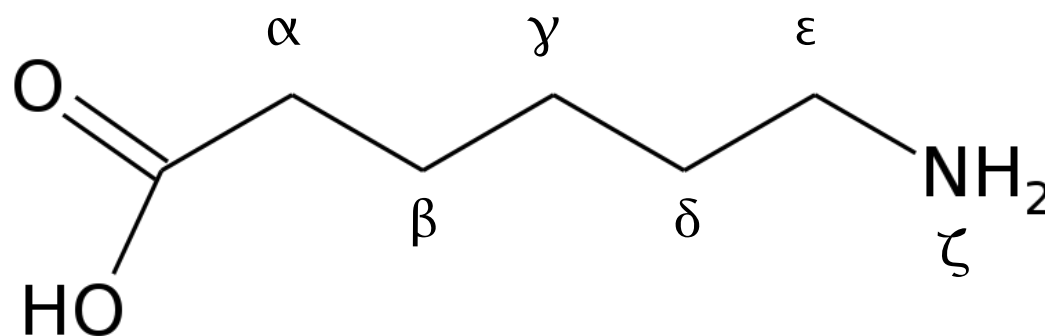


Amino grupės savybės

Aminai yra baziniai (t.y. prisijungia protoną):

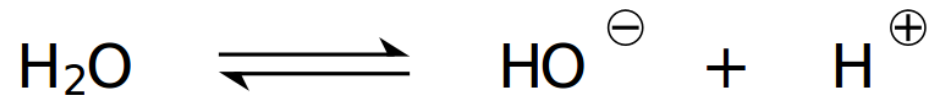


Amino rūgštys, biocheminė nomenklatūra



αβγδε(ε)ζηθ(θ)ικλμνξοπρσ(ς)τυφ(φ)χψω

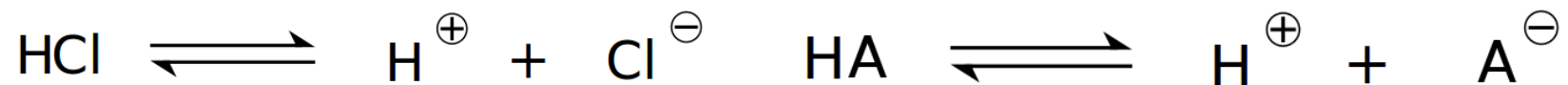
pH, buferiai, vandens joninė sandauga



$$K = \frac{[\text{H}^+][\text{OH}^-]}{[\text{H}_2\text{O}]} = \text{const} \quad [\text{H}_2\text{O}] \gg [\text{H}^+] \Rightarrow [\text{H}_2\text{O}] = \text{const}$$

Neutralioje terpėje:

$$[\text{H}^+][\text{OH}^-] = \text{const} = 10^{-14} \text{ M}^2 \quad \text{pH} = -\log_{10}[\text{H}^+] = 7$$

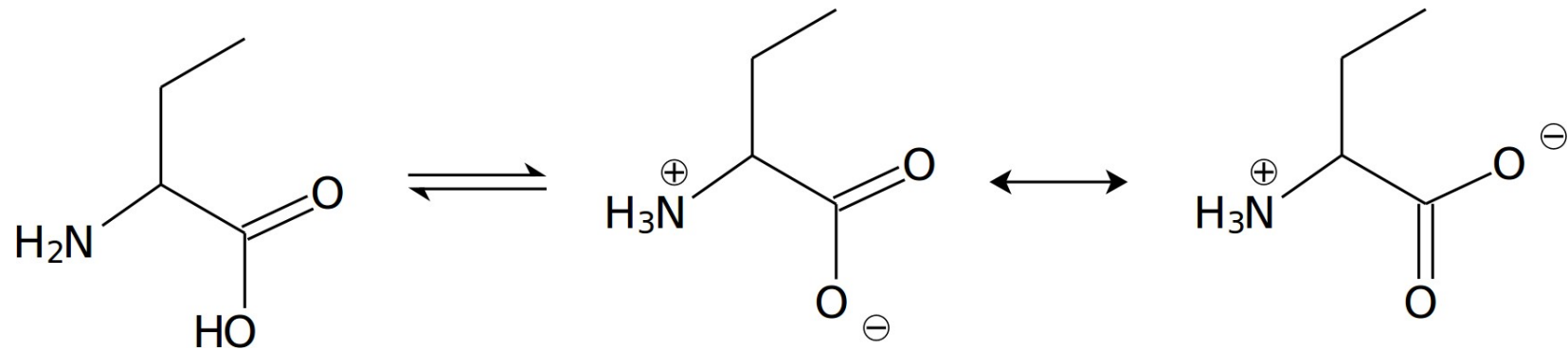


Hendersono-Haselbacho (Henderson–Hasselbalch) lygtis:

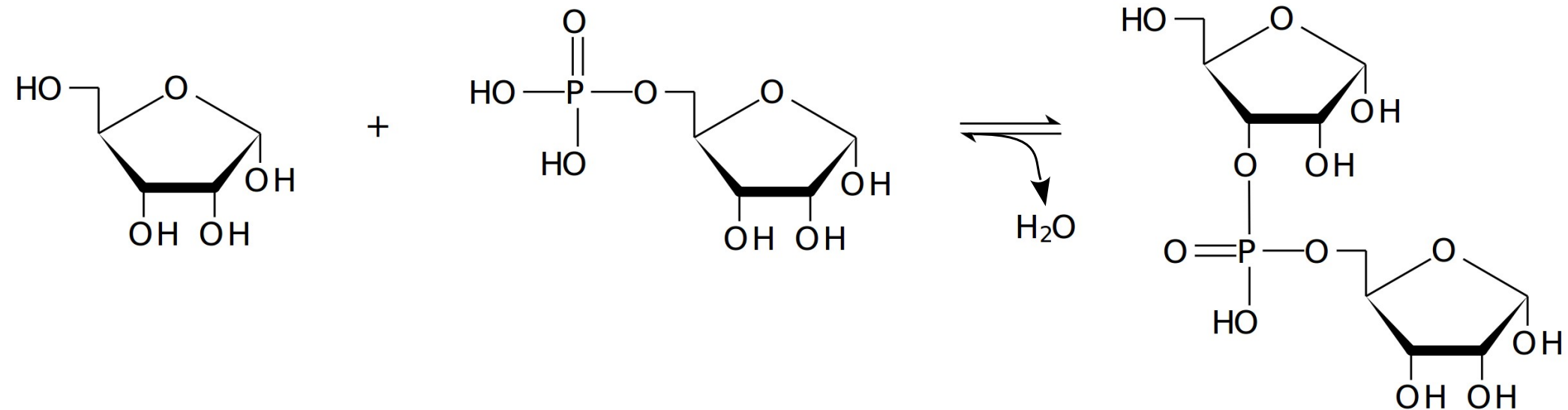
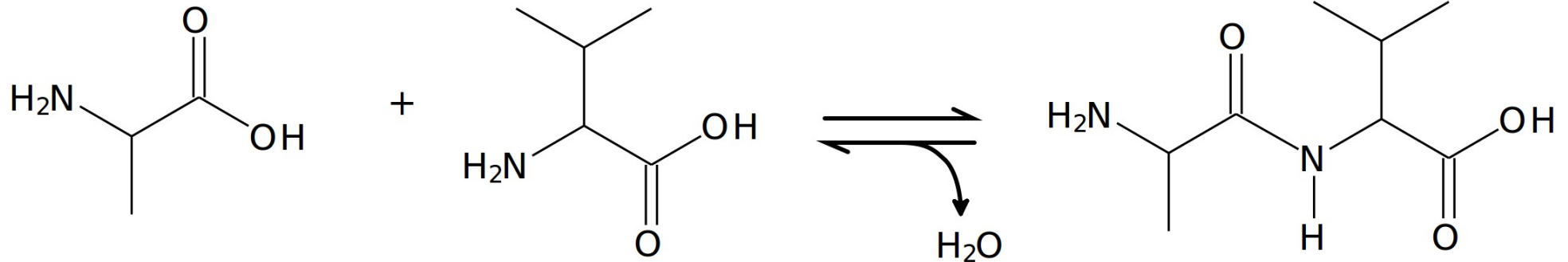
$$\text{pH} = \text{p}K_a + \log_{10} \frac{[\text{A}^-]}{[\text{HA}]}$$

Cviterjonai

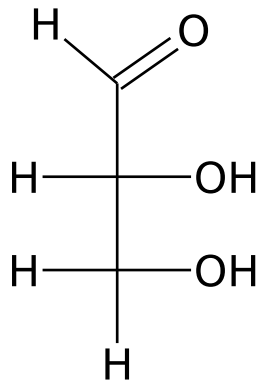
Amino rūgštys tirpale ir kristaluose egzistuoja vidinių druskų – cviterjonų pavidale:



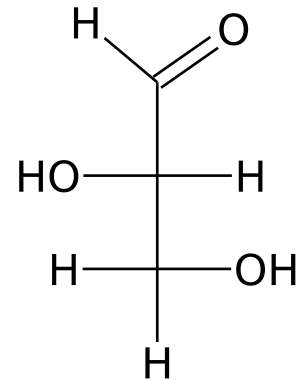
(Poli)kondensacija



Angliavandeniai. Glicerino aldehydas

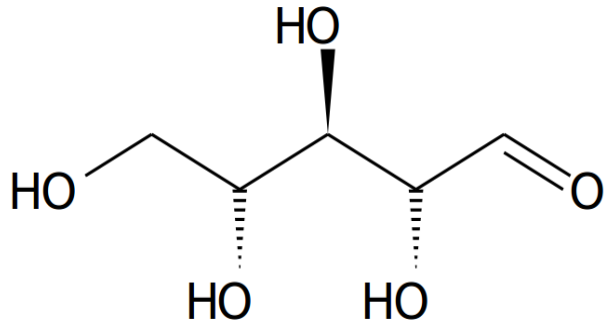


D-glyceraldehyde
(R)-glyceraldehyde
(+)-glyceraldehyde

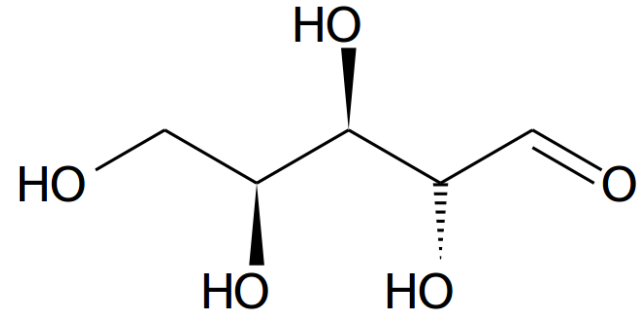


L-glyceraldehyde
(S)-glyceraldehyde
(-)-glyceraldehyde

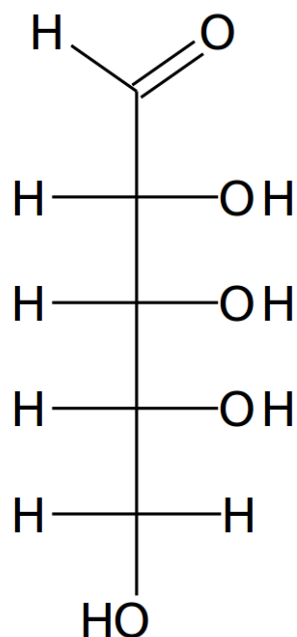
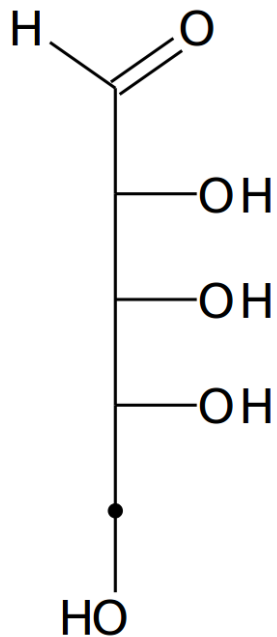
Cukrai (sacharidai)



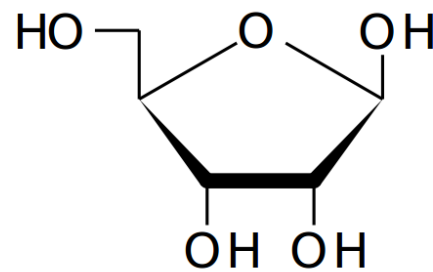
D-Ribozė – tiesinė forma



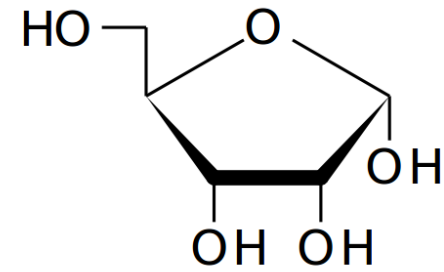
Kita pentozė



Fišerio projekcijos



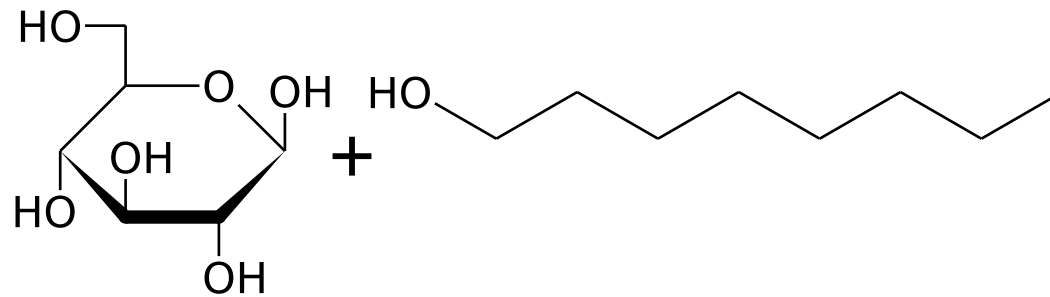
beta



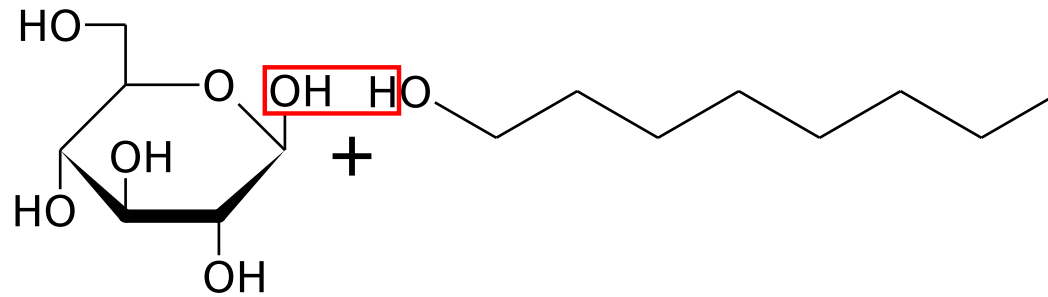
alpha

Ribofuranozė

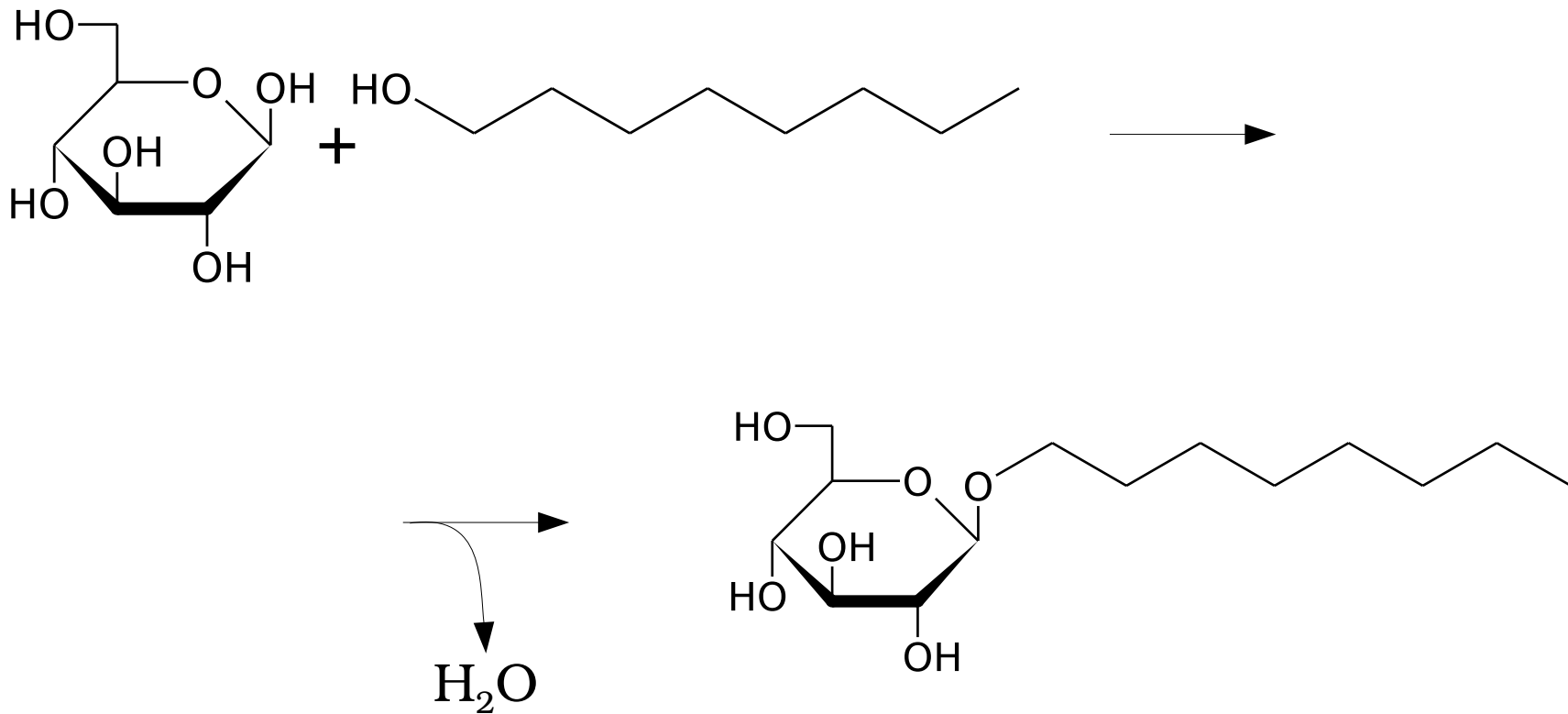
Glikozidai



Glikozidai

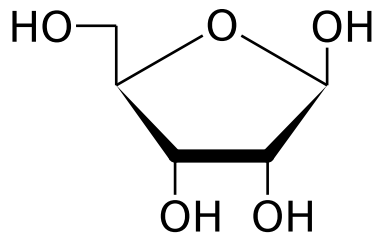


Glikozidai

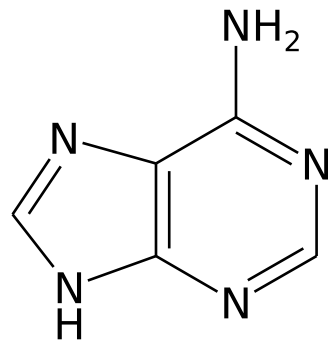


Octyl glucoside (n-octyl- β -D-glucoside)

Glikozidai (Nukleozidai)

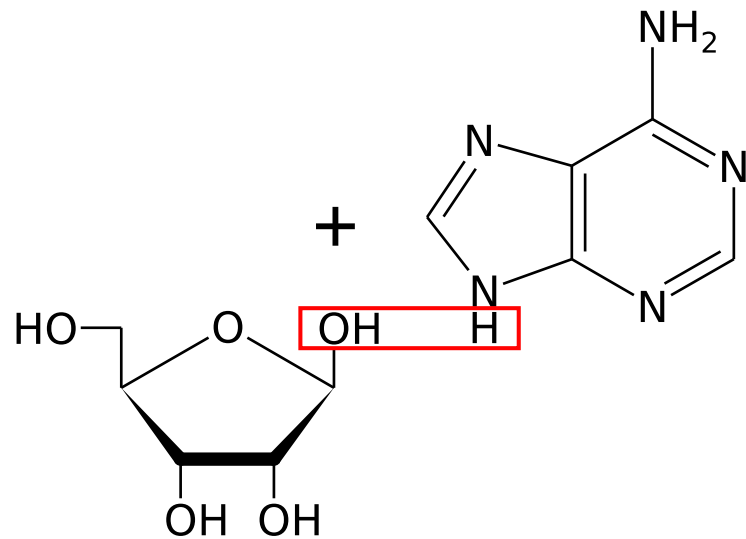


Ribožė

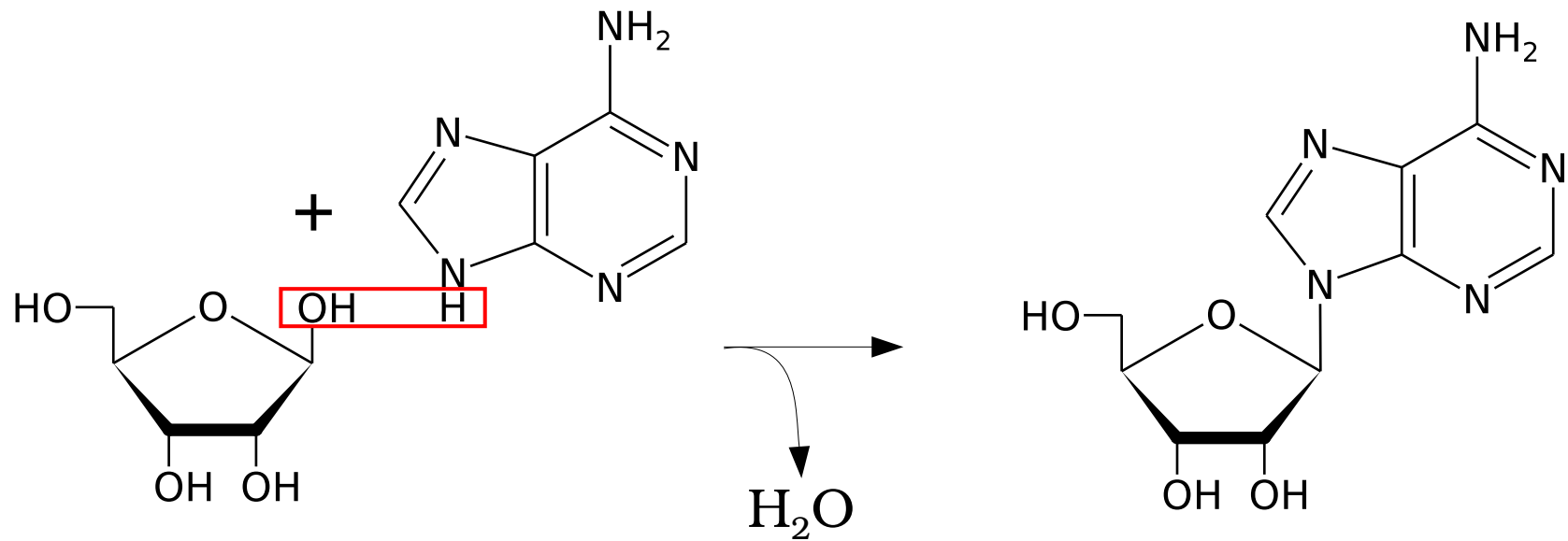


Adeninas

Glikozidai (Nukleozidai)

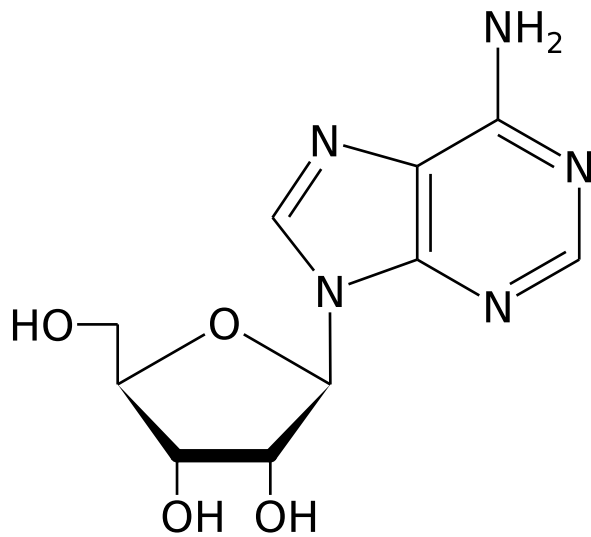


Glikozidai (Nukleozidai)

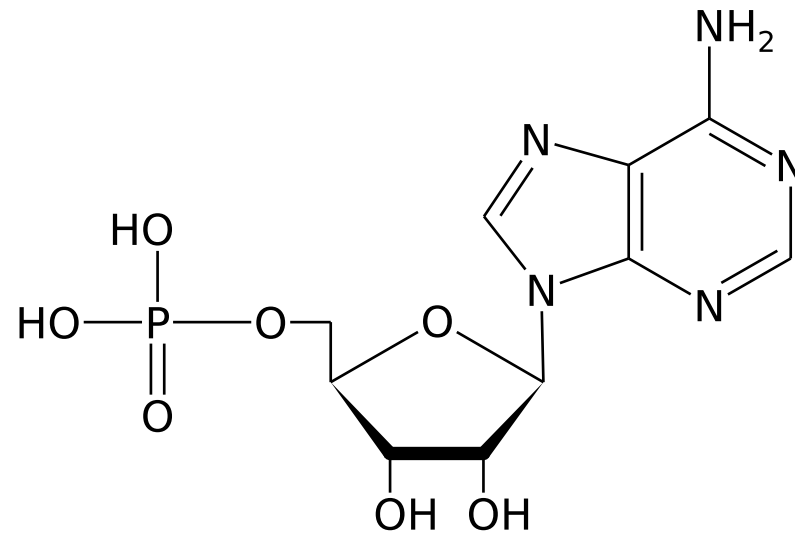


Adenozinas
(nukleozidas)

Nukleozidai ir nukleotidai

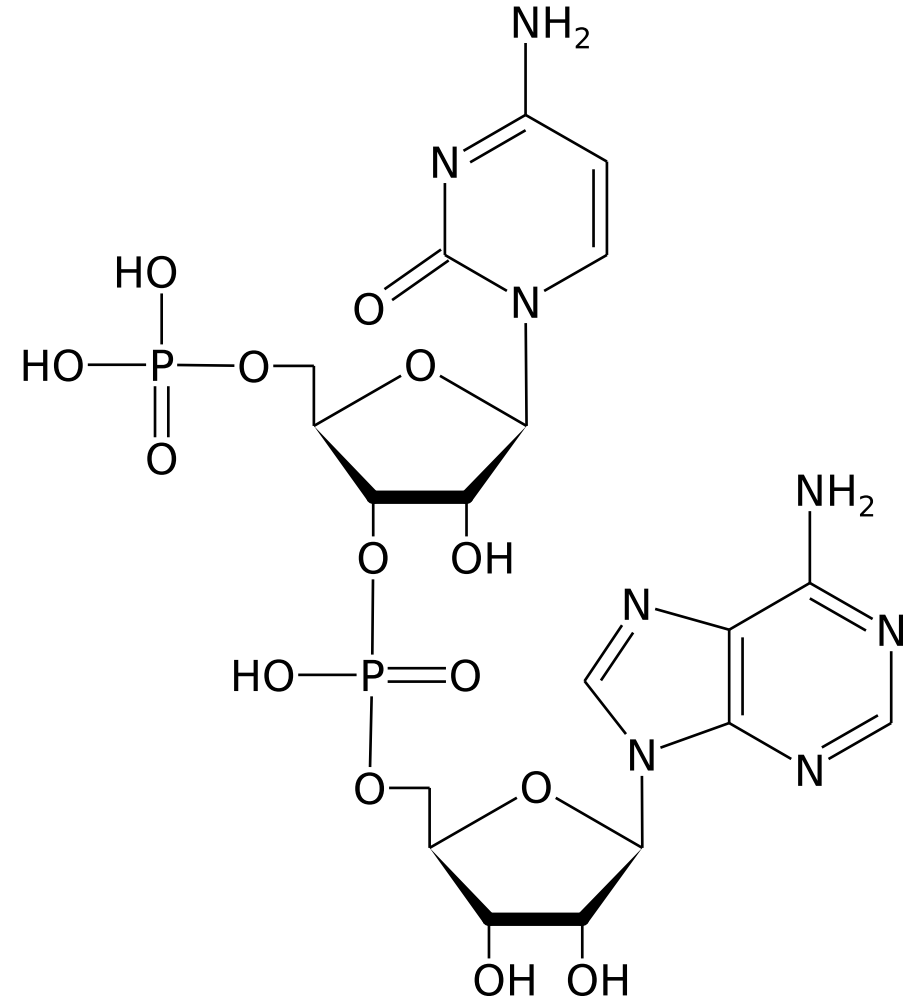
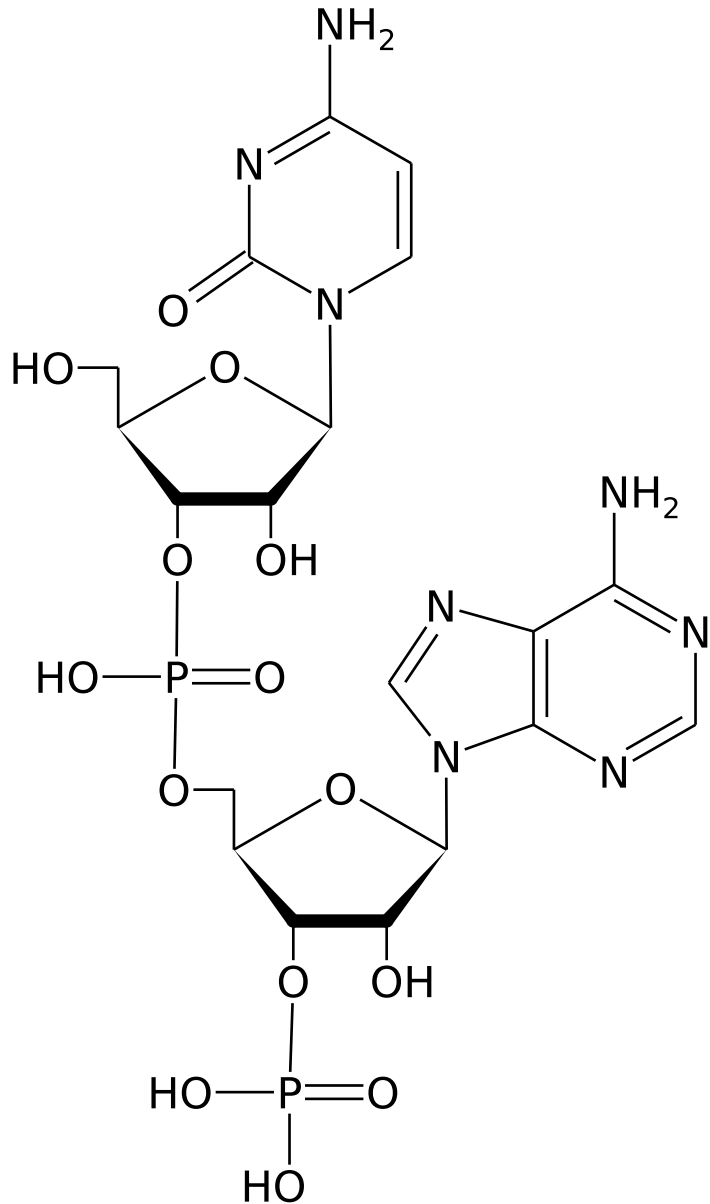


Adenozinas
(nukleozidas)

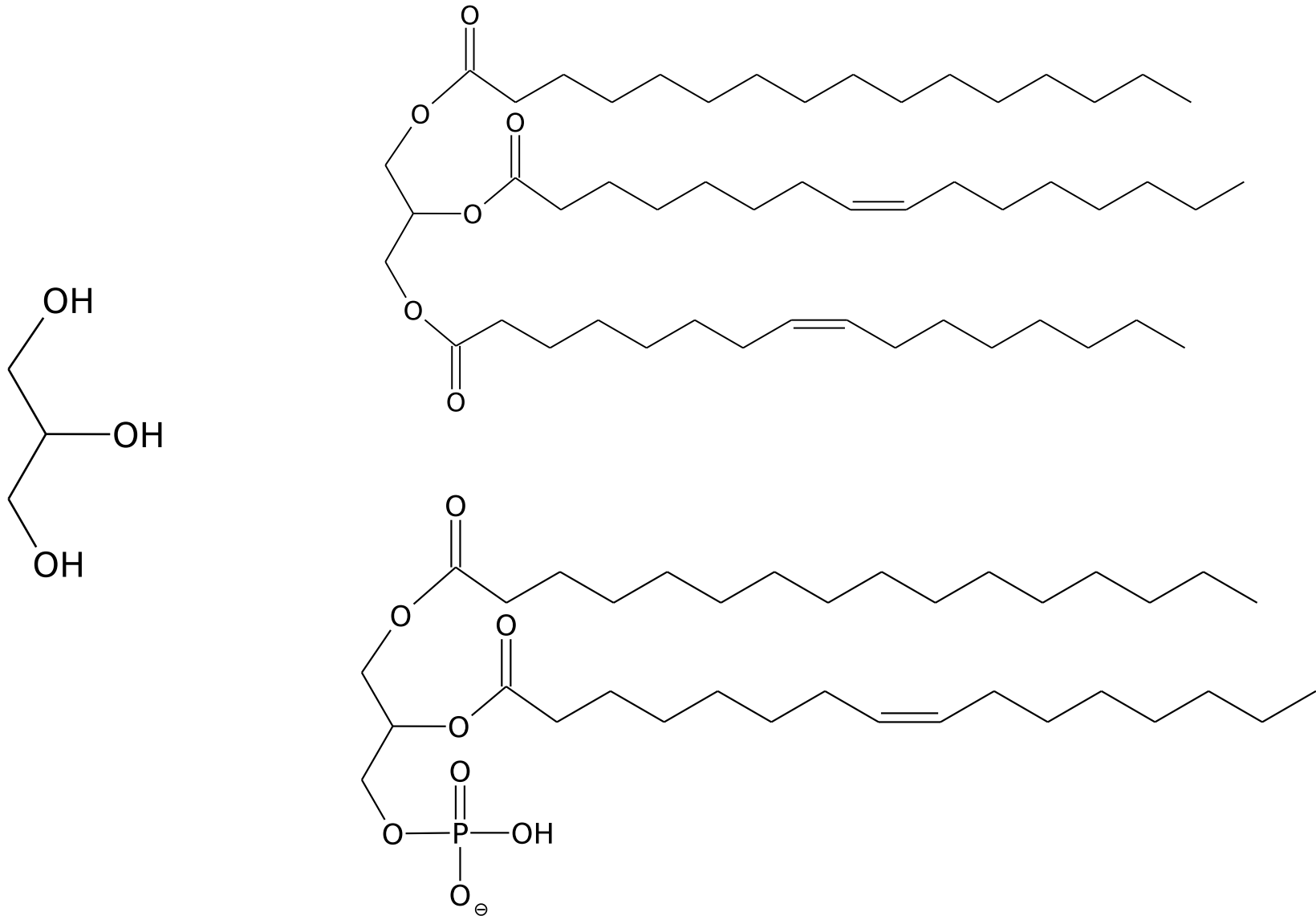


Adenozino fosfatas
(nukleotidas)

Nukleo- (nukleininės) rūgštys



(Fosfo-)lipidai



Pagrindinės temos

- ✓ cviterjonai
- ✓ polikondensacija
- ✓ el. disociacija
- ✓ joninė sandauga
- ✓ pusiausvyra
- ✓ pH ir buferiai
- ✓ cukrai
- ✓ glikozidai
- ✓ nukleotidai
- ✓ nukleorūgštys
- ✓ (fosfo-)lipidai