

# Bioinformatika III

## Trimačių struktūrų analizė ir spėjimas

Paskaita 10  
nekovalentinės sąveikos  
baltymuose

Saulius Gražulis  
2011 m.

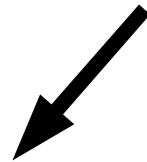
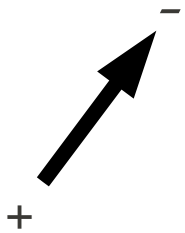
# Nekovalentinės sąveikos baltymuose

- Van der Valso (Van der Waals) sąveika
- Vandeniliniai ryšiai
- Hidrofobinė sąveika
- Elektrostatinė sąveika
- (Jonų- $\pi$  elektronų sąveika)

# Van der Valso (Van der Waals) sąveika

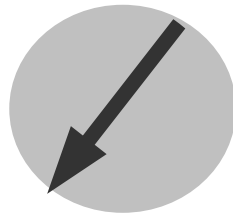
- Traukos jėgos:
  - dipolio – dipolio sąveika
  - dipolio – indukuoto dipolio sąveika
  - dviejų indukuotų dipolių sąveika
- Atostūmio jėgos
  - elektronų orbitalių atostūmis, paaiškinamas Paulio principu
- Ryšio energija: 0.4—2.0 kJ/mol (0.1—0.5 kcal/mol)

# Van der Valso (Van der Waals) sąveika (2)



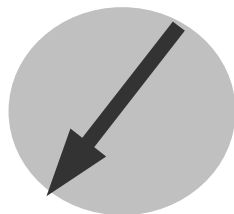
Keesom'o sąveika:

$$U = -\frac{C_{Keesom}}{r^6}$$



Debajaus (Debye) sąveika:

$$U = -\frac{C_{Debye}}{r^6}$$

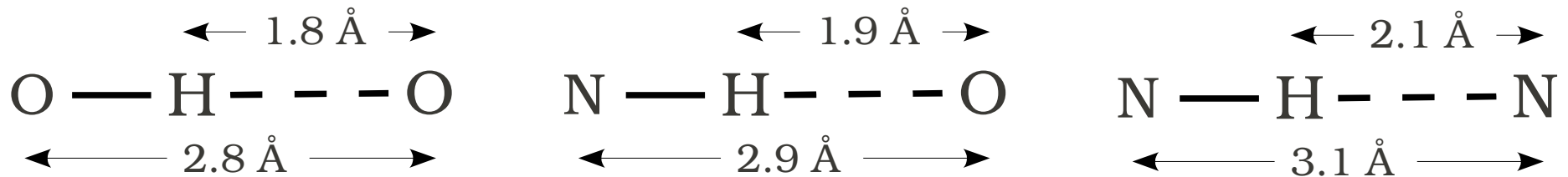


Londono dispersinės jėgos:

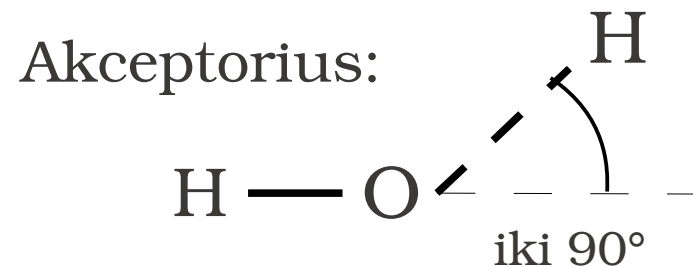
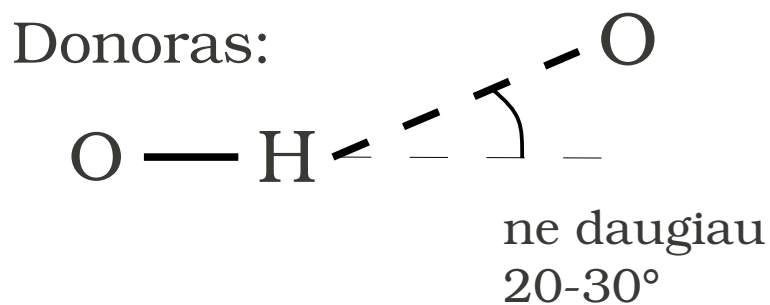
$$U = -\frac{C_{London}}{r^6}$$

# Vandenilinės jungtys

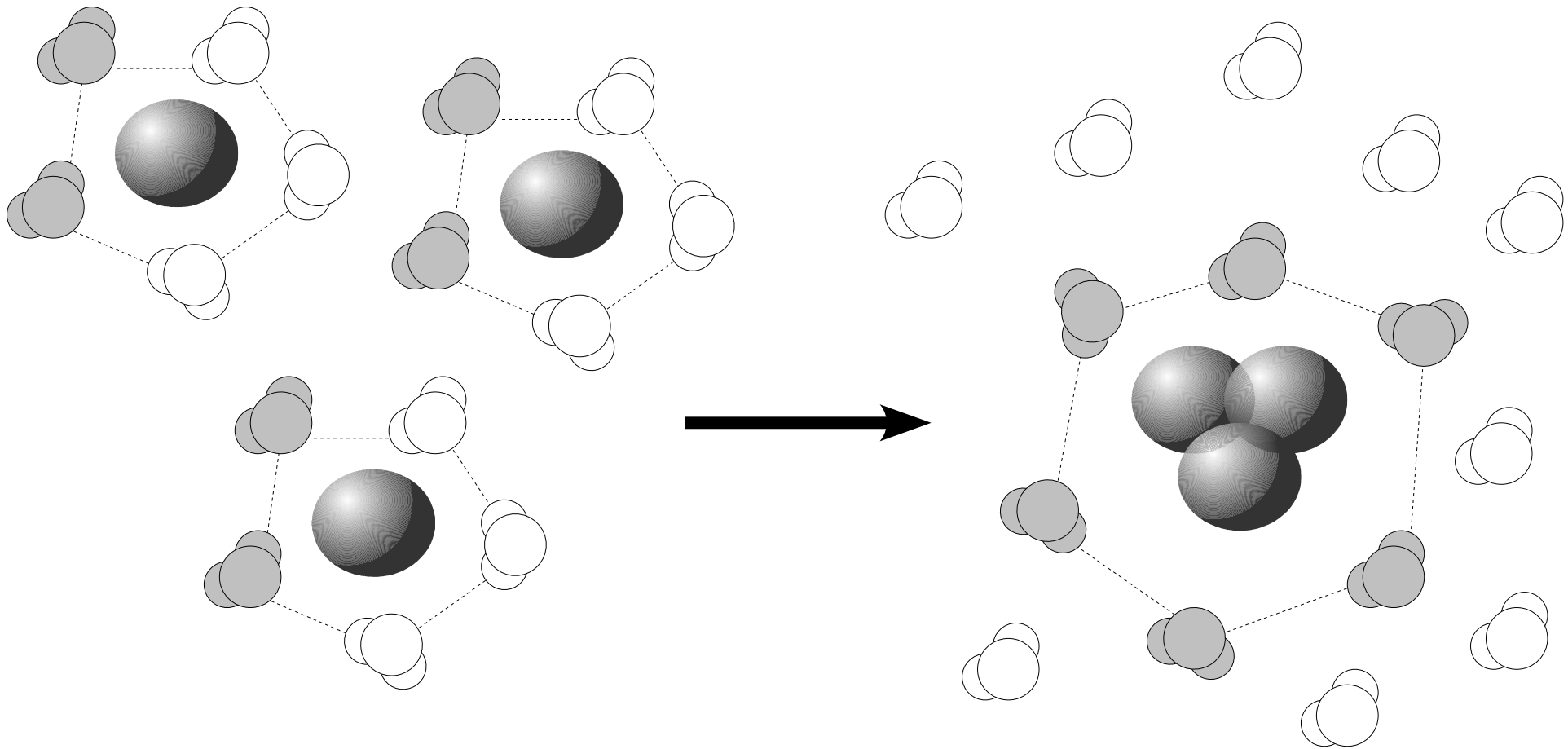
- Energija 20 — 40 kJ/mol (5 — 10 kcal/mol)
- Ilgis 2.8 – 3.1 Å



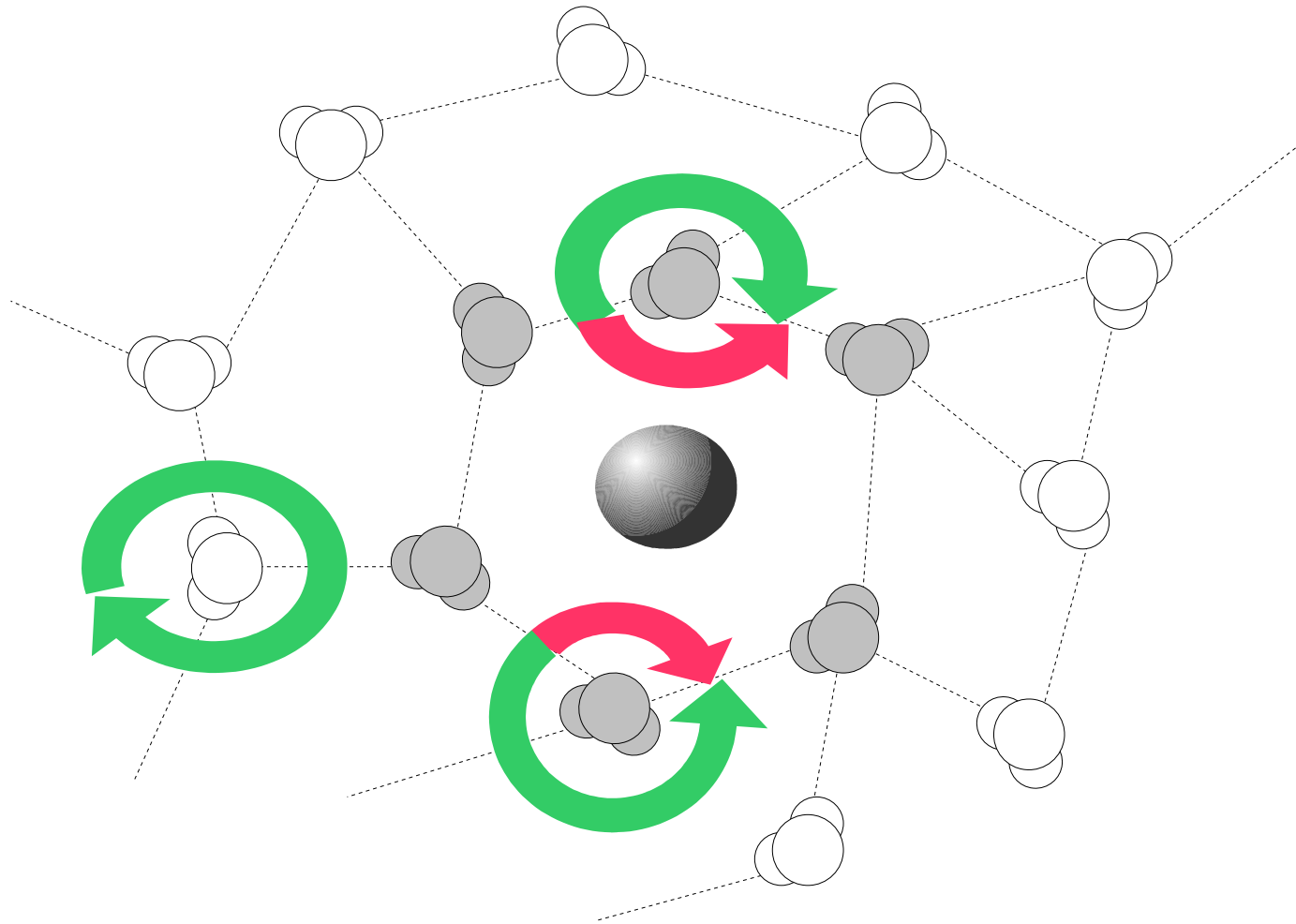
- Kryptingos:



# Hidrofobinė sąveika *a la* Karshikoff



# Hidrofobinė sąveika *a la* Finkelštein



А. В. Финкельштейн, О. Б. Птицын, *Физика белка*,  
Москва, КДУ, 2005, psl. 61 ir toliau

# Hidrofobiškumas

- Amino rūgšties perkėlimo į hidrofobinę aplinką laisvąją energiją ( $\Delta G_t$ ) galime suskaidyti į glicino perkėlimo  $\Delta G_t^{\text{Gly}}$  ir šoninės grandinės perkėlimo energiją (hidrofobiškumą)  $\Delta g_t$ :

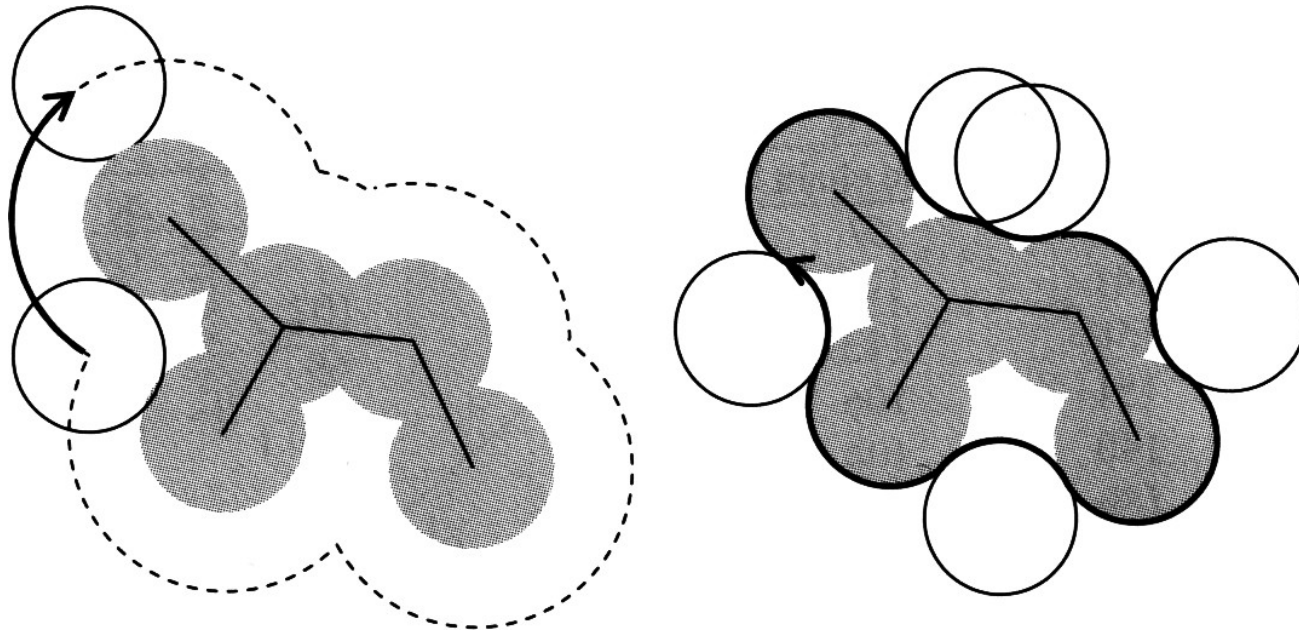
$$\Delta G_t = \Delta G_t^{\text{Gly}} + \Delta g_t$$



# Hidrofobiškumas ir pavirčiaus plotas

- Efektas adityvus ir skirtingoms šoninių grandinių dalims
- Hidrofobiškumas proporcingas alifatinės grandinės tirpikliui prieinamam paviršiui

# Tirpikliui prieinamas paviršius



# Elektrostatinė sąveika

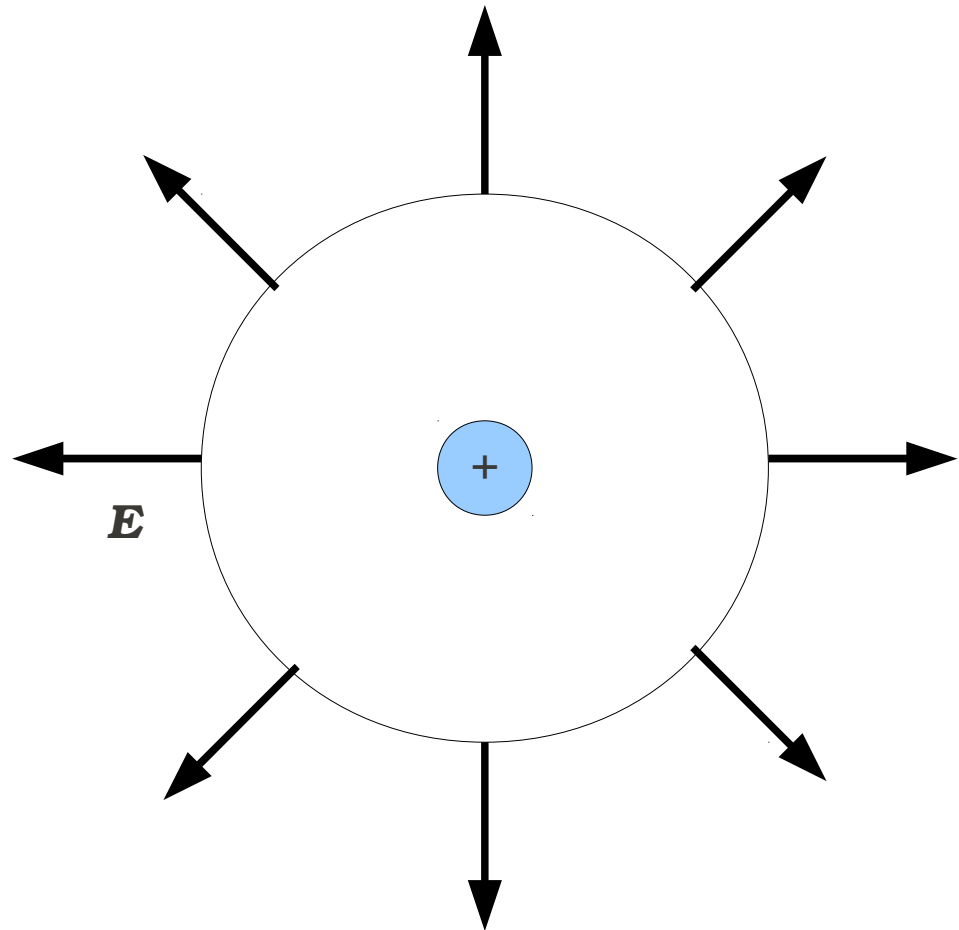
- Kulono (Coulomb) dėsnis
- Debajaus-Hiukelio (Debye-Hückel) teorija
- Borno (Born) lygtis
- Puasono-Bolcmano (Poisson-Boltzmann) lygtis

# Kulono (Coulomb) dēsniš

$$F = k_0 \frac{q_1 q_2}{r^2}$$

$$k_0 = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} = 9 \cdot 10^9 [m/F]$$

$$\epsilon\epsilon_0 \nabla^2 \varphi = -\rho$$

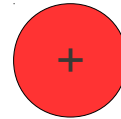


# Solvatacijos energijos

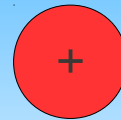
Sferiniam jonui: Borno formulė

$$\Delta G_{transfer} = 116 \frac{q^2}{r} \left( \frac{1}{\epsilon_2} - \frac{1}{\epsilon_1} \right)$$

Bet kokios formos dalelei:  
P-B lygties sprendimas

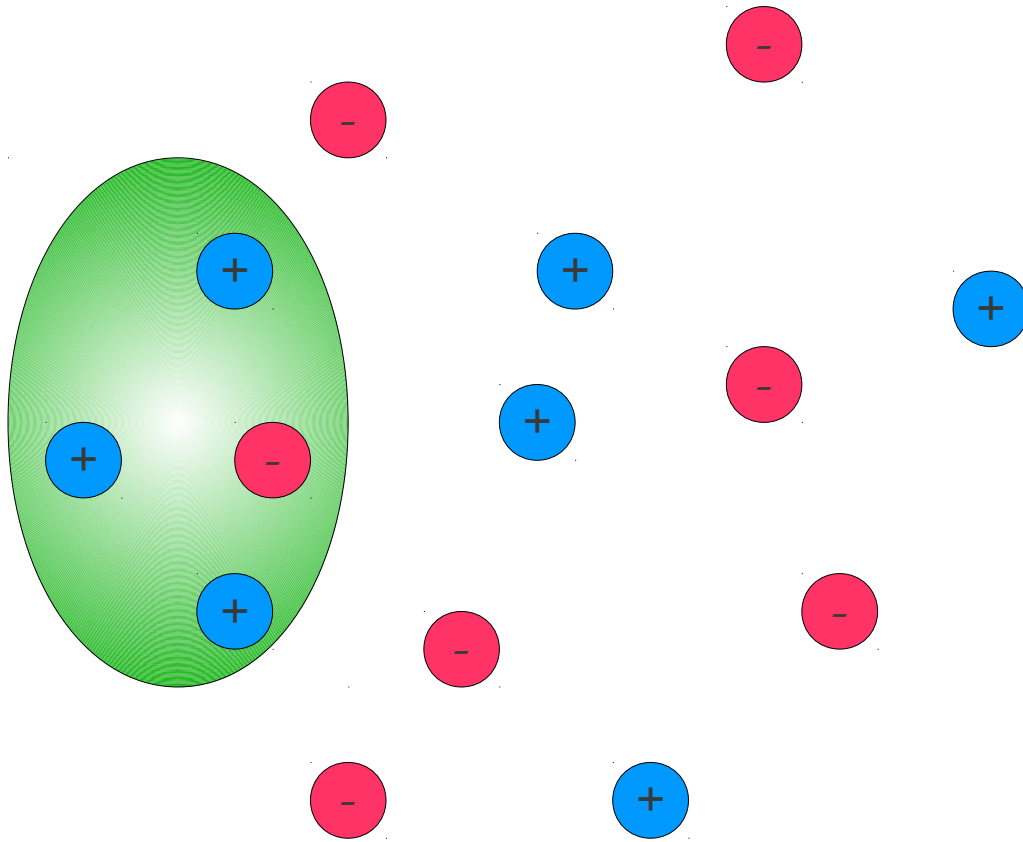


$$\epsilon = 1$$



$$\epsilon = 78$$

# Krūvių pasiskirstymas aplink molekulę



Puasono lygtis:

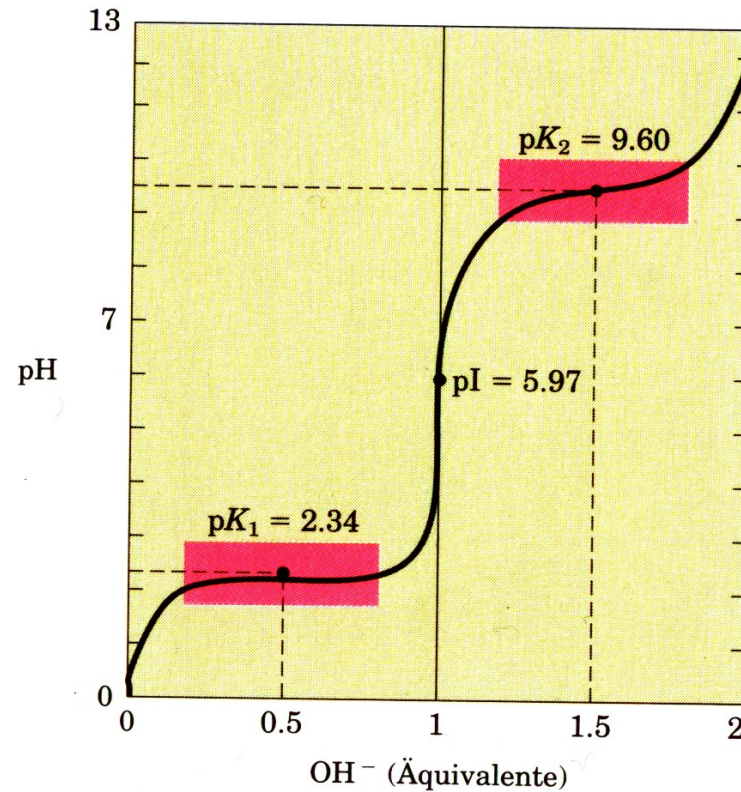
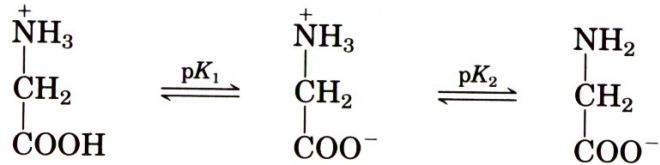
$$\varepsilon_0 \nabla (\varepsilon(\vec{r}) \nabla \varphi) = -\rho$$

Bolcmano pasiskirstymas:

$$\rho_i = z_i c_i = z_i c_{i0} e^{-\frac{z_i \varphi}{kT}}$$

$$\varepsilon_0 \vec{\nabla} (\varepsilon(\vec{r}) \vec{\nabla} \varphi) = -\rho_p - \sum_i z_i c_{i0} e^{-\frac{z_i \varphi}{kT}}$$

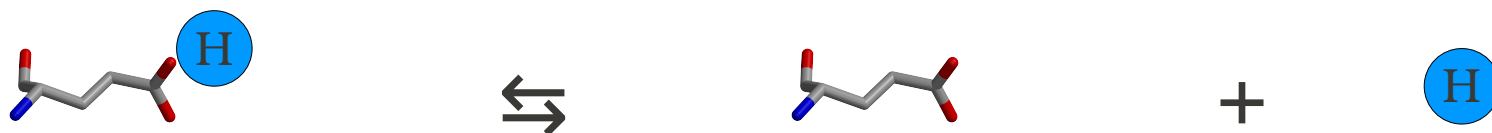
# Baltymų jonizacijos pusiausvyros



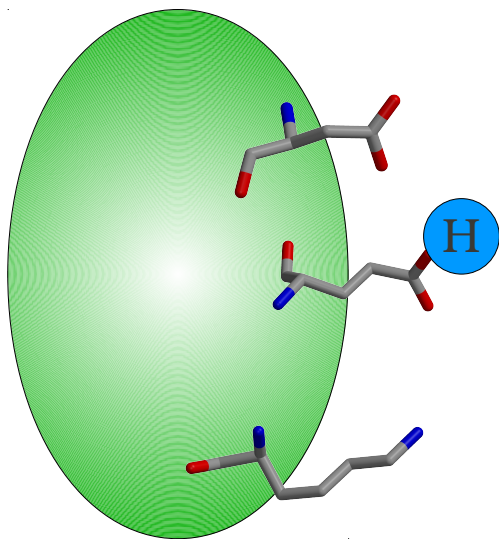
# Lokaliios pK reikšmės

*In aqua:*

$$\Delta G = -RT \ln K = 2.3RT pK$$
$$pK = -\lg K$$



P-B sprendinys 1



P-B sprendinys 2

