



INVESTICE DO ROZVOJE VZDĚLÁVÁNÍ

**F1190 Úvod do biofyziky
Masarykova Univerzita
Podzimní semestr 2023**

Řešení úlohy z 19.10.2023

Vyučující:

Prof. Jiří Kozelka, Biofyzikální Laboratoř, Ústav fyziky kondenzovaných látek, PŘF MU, Kotlářská 2, kozelka.jiri@gmail.com

Seznam krátkých kontaktů (<3 Å) H---O a H---N mezi derivátem CPAD kofaktoru NAD⁺ a vazebným místem v alkohol dehydrogenáze (pdb 1adc)

X	-	H	---	Y	X-H (Å)	X-H---Y (°)
ARG47:N	-	ARG47:H	---	PAD377:O1N	2.36	159.44
ARG47:NH1	-	3ARG47:HH11	---	PAD377:O1A	2.06	146.82
PAD377:O2D	-	PAD377:HO2N	---	SER48:OG	2.45	119.55*
SER48:OG	-	SER48:HG	---	PAD377:O2D	2.32	134.29
HIS51:NE2	-	HIS51:HE2	---	PAD377:O3D	2.05	158.90
HIS51:NE2	-	HIS51:HE2	---	PAD377:O2D	2.83	105.63*
LEU200:N	-	LEU200:H	---	PAD377:O3B	2.58	135.52
GLY202:N	-	GLY202:H	---	PAD377:O2A	2.74	145.37
VAL203:N	-	VAL203:H	---	PAD377:O2N	2.25	160.322
PAD377:O3B	-	PAD377:HO3A	---	ASP223:OD2	2.50	80.55*
ILE224:N	-	ILE224:H	---	PAD377:N3A	2.78	150.68**
PAD377:O3D	-	PAD377:HO3N	---	ILE269:O	1.98	155.47
PAD377:N7N	-	PAD377:H71N	---	VAL292:O	2.17	156.55
VAL294:N	-	VAL294:H	---	PAD377:O3D	2.67	172.36
PAD377:N7N	-	PAD377:H72N	---	ALA317:O	2.03	155.03
PHE319:N	-	PHE319:H	---	PAD377:O7N	1.91	160.72
ARG369:NH1	-	ARG369:HH12	---	PAD377:O1N	2.41	161.22
ARG369:NH2	-	ARG369:HH22	---	PAD377:O1N	2.74	145.96

* Při úhlech X-H---Y < 120° repulze X---Y vyvažuje přitažlivou elektrostatickou interakci H---Y. Navíc je kvůli slabému překryvu nevazebného orbitálu na atomu Y a antivazebného orbitálu vazby X-H kovalentní složka vodíkového můstku oslabena. Vodíkový můstek je tudíž velmi slabý. Při úhlech X-H---Y > 90° se již zpravidla nejedná o přitažlivou interakci.

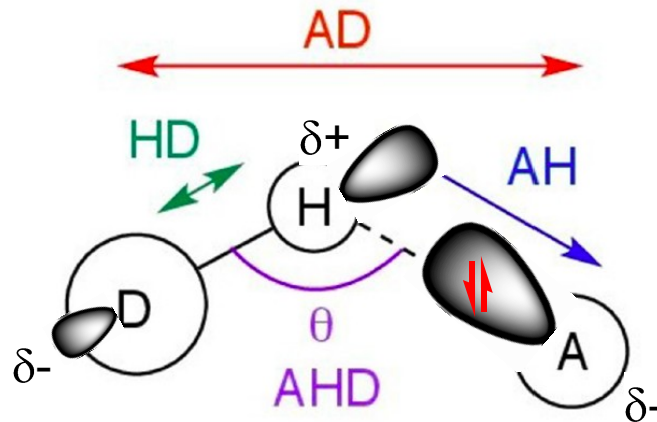
** Akceptor je π -systém adeninu

Viz dva následující diapozitivy

Kovalentní složka H-můstku:

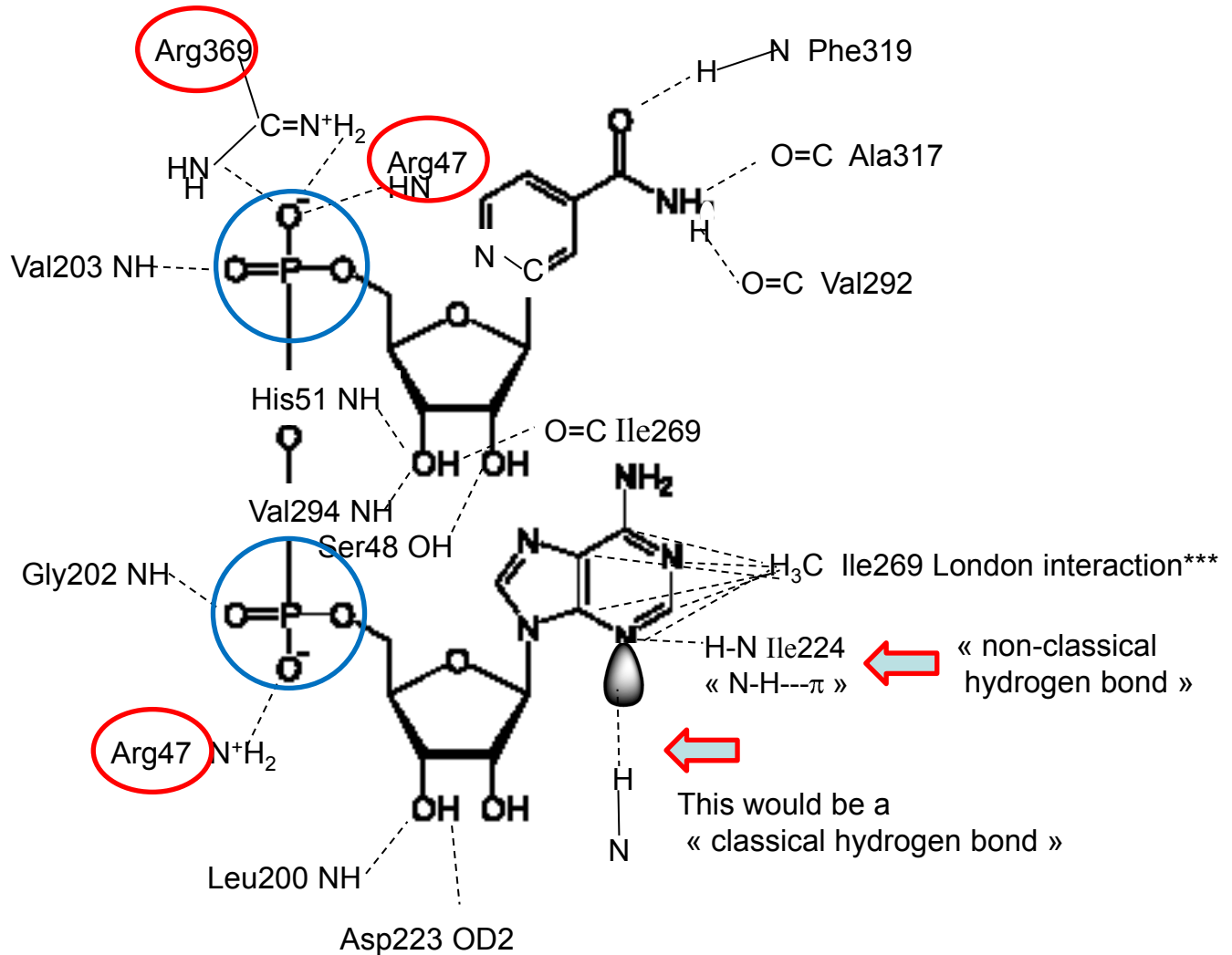
Vzniká překryvem orbitálu volného el. páru na akceptoru A s antivazebným orbitálem vazby D-H. Silně závisí na úhlu D-H---A !

(v našem seznamu má donor D značku « X » a akceptor A značku « Y »)



D: Donor atom
A: Acceptor atom
H: Hydrogen atom

Schématické znázornění vodíkových vazeb mezi derivátem CPAD kofaktoru NAD⁺ a aminokyselinami ve vazebném místě v alkohol dehydrogenáze (pdb-kód 1adc)



viz následující diapozitiv***

*** V zadání úlohy e) « Rozšiřte vyhledávání na kontakty C-H---Y (tedy X = C), přidejte je do seznamu kontaktů odděleně »
jsem nevzal v úvahu, že soubor souřadnic 1adc neobsahuje vodíkové atomy vázané na atomy uhlíku, takže je vyhledáváním krátkých odstupů H---N nebo H---O nenajdete.

Vyhledávat krátké kontakty mezi vazbami C-H na jedné straně a elektronegativními atomy (O,N) na straně druhé je tedy možné jen na základě vzdáleností C---N a C---O. Krátké vzdálenosti C---N pod 4 Å, (takže některé kontakty H---N jsou < 3 Å) má uhlík CD1 methylové skupiny postranního řetězce aminokyseliny isoleucin ILE269 s dusíkovými atomy šestičlenného kruhu adeninu v molekule CPAD. Takové interakce mezi prakticky nepolárním atomem vodíku (takto hovoříme o atomu nesoucímu téměř nulový parciální pozitivní náboj; rozdíl elektronegativit pro C a H je 2.5-2.1=0.4) a aromatickým kruhem cyklické skupiny pozorujeme často v krystalových strukturách organických sloučenin. Jsou to ukázkové příklady Londonových interakcí.

Tuto úlohu ještě prodiskutujeme na přednášce 14.12.2023, takže si na ni prosím připravte případné dotazy.