

Řešení úlohy A) z 5.12.2024

Proximální histidin 93 se váže atomem N_{ϵ} na iont železa hemu, nemůže mít tedy H-atom na atomu $N_{\epsilon a}$ nachází se tedy v tautomerní formě N_{δ} .

Distální histidin HIS93 má svůj atom N_{ϵ} ve vzdálenosti 2.77 Å (chain A) od atomu O2 molekuly kyslíku vázané svým atomem O1 na iont železa. To je vzdálenost ideální pro vodíkový můstek, navíc leží atom O2 téměř v rovině pětičlenného kruhu distálního histidinu a blízko osy úhlu CE1-NE2-CD2, což je indikace pro přibližně lineární vodíkový můstek N-H...O. Lze tedy usuzovat na tautomer N_{δ} .