

MOLEKULSKE SILE

Na molekulski ravni prevladujejo elektromagnetne sile, ki jih lepo razložimo s kvantno kemijo. Glavna ideja je odkriti distribucijo elektronov okoli fiksnih jeder atomov, katerih pozicije opišejo molekulo. Ampak proteini so prevelike strukture, da bi lahko izračunali za vsako jedro atoma distribucijo njegovih elektronov, zato se kvantna kemija uporablja le za do nekaj deset atomov.

1 Kovalentne interakcije

To so v bistvu kovalentne vezi. Te se tvorijo, ko si dva atoma delita elektrone. Enojna vez nastane ko si delita en par elektronov, dvojna pa ko si delita dva para... Kvantna kemija razloži ta pojav s povečanjem elektronske gostote med atomoma, ki pa se razširi tudi čez ostali del molekule. To je predvsem vidno pri delokaliziranih vezeh. Delokalizirane vezi pa so pomembne v proteinski strukturi. Povzročijo planarnost peptidne vezi in igrajo vlogo pri stranskih skupinah fenilalanina, triptofana, glutaminske kisline in arginina.

Koti v kovalentni vezi

Dihedralni kot v peptidni vezi lahko zasede dve stanji, in sicer 0 stopinj ali 180 stopinj. 0 v cis konformaciji in 180 v trans konformaciji.

2 Nevezne interakcije

Ne pride do kovalentne vezi. Do neveznih interakcij pride med kovinskim ionom in ligandi.

Elektrostatske interakcije

Če atom dobi ali izgubi elektron, postane nabit. Bazični aminokislinski ostanki so pri nevtralnem pH pozitivno nabiti (arginin, lizin). Nekateri kisli aminokislinski ostanki pa so negativno nabiti (asparaginska kislina, glutaminska kislina). S temi negativnimi naboji lahko vežejo razne kovinske ione, ki pomagajo pri funkciji proteina oz. encima.

Solni most

Solni most nastane, ko se povežeta pozitivno nabita arginin ali lizin z negativno nabitima asparaginsko in glutaminsko kislino. Solni mostovi so zelo redko v zgradbi proteina, in ponavadi na površini in ne v notranjosti strukture razen pri katalitični triadi serinskih proteinaz, Asp-His-Ser.

H vezi (vodikove vezi)

Elektrostatske interakcije med skupinami brez naboja so zelo pomembne pri proteinski strukturi. Mednje spada vodikova vez. Orbitale polarizirane molekule so porazdeljene tako, da ima določen del molekule manj elektronov in ima delni pozitiven naboj, določen pa več elektronov in nosi delno negativen naboj. Dušik, kisik in žveplo so elektronegativni in privlačijo elektrone v kovalentni vezi. Tipična takšna molekula je voda. Na vodikih se ustvari delno pozitiven naboj, saj elektronegativni atomi privlačijo elektrone k sebi. Dve molekule vode lahko tako tvorita močno elektrostatsko interakcijo, ki ji pravimo vodikova vez.

V proteinski strukturi nastopa v alfa heliksu in v beta strukturah in jih stabilizira. Tudi stranske verige aminokislin lahko tvorijo vodikove vezi; tiste ki vsebujejo kisik ali dušik. Posebno močne vodikove vezi potekajo med nabito skupino in skupino, ki vsebuje vodik ($O=CNH$ in $O-C=O$).

Disperzijske interakcije (privlačne)

Disperzijske sile so odvisne od bližine atomov. Ker atomi, ki niso nabiti vibrirajo, prihaja do dipola. Ta dipol inducira dipol pri bližnjem atomu in atoma se privlačita.

Repulzijske interakcije (odbojne)

Če pa se atoma preveč približata prihaja do odbojnih interakcij, saj se orbitale začnejo prekrivati.

3 Vpliv topila in hidrofobne interakcije

Interakcija dveh nabojev je zmeraj zmanjšana v topilu. Zmanjša se za faktor, ki mu pravimo dielektrična konstanta topila. Ta konstanta je odvisna od dipola, ki se inducira, ko dodamo električno polje. Torej v proteinu je prostor okoli nabojev ponavadi zapolnjen z dipoli, ki jih predstavlja voda.

Hidrofobni efekt je čisti entropični efekt. Nepolarne specije se združujejo v agregate v polarnem mediju, zato, da je površina v stiku s polarnim medijem čim manjša.