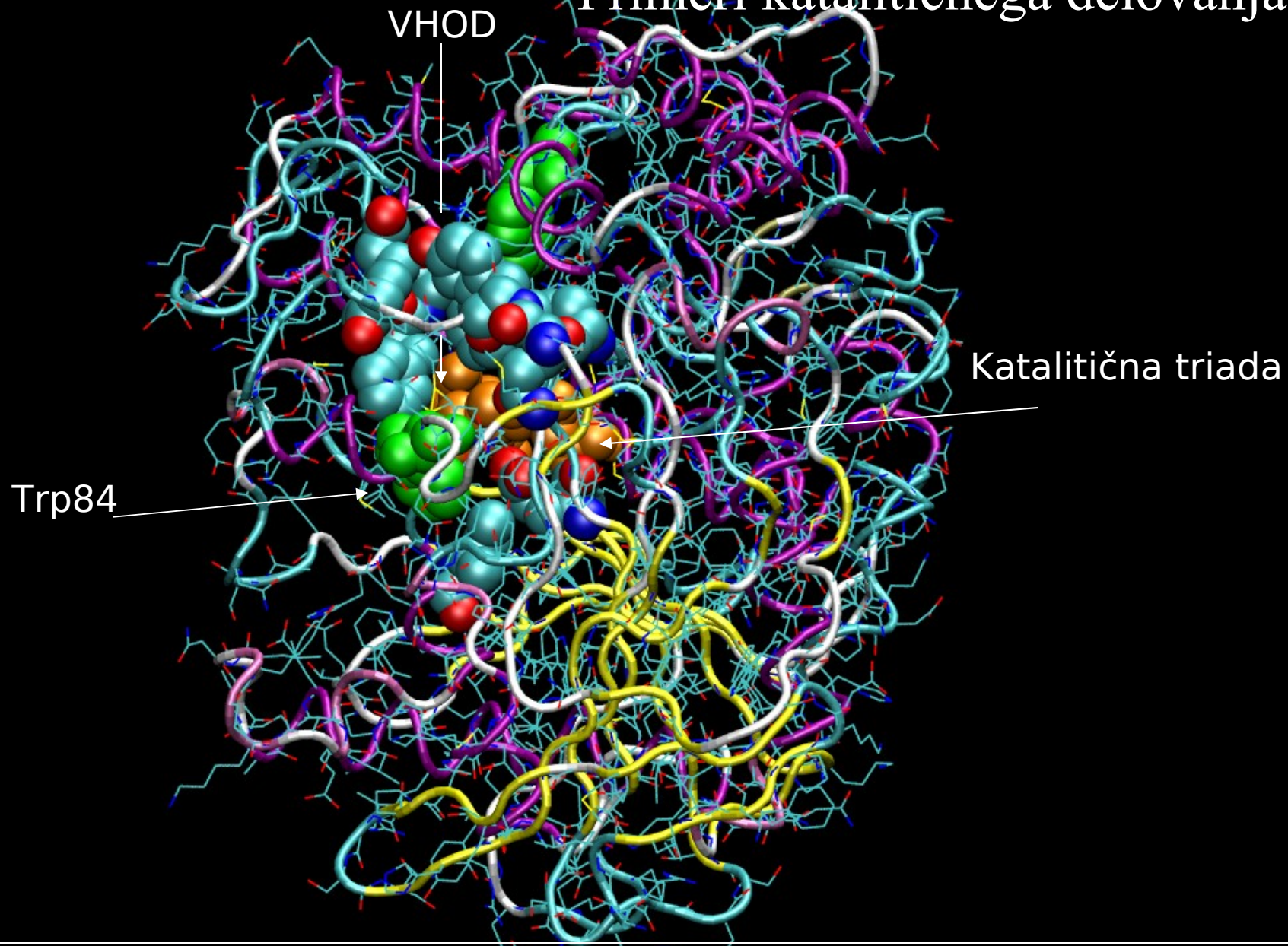


Jure Stojan  
6. predavanje

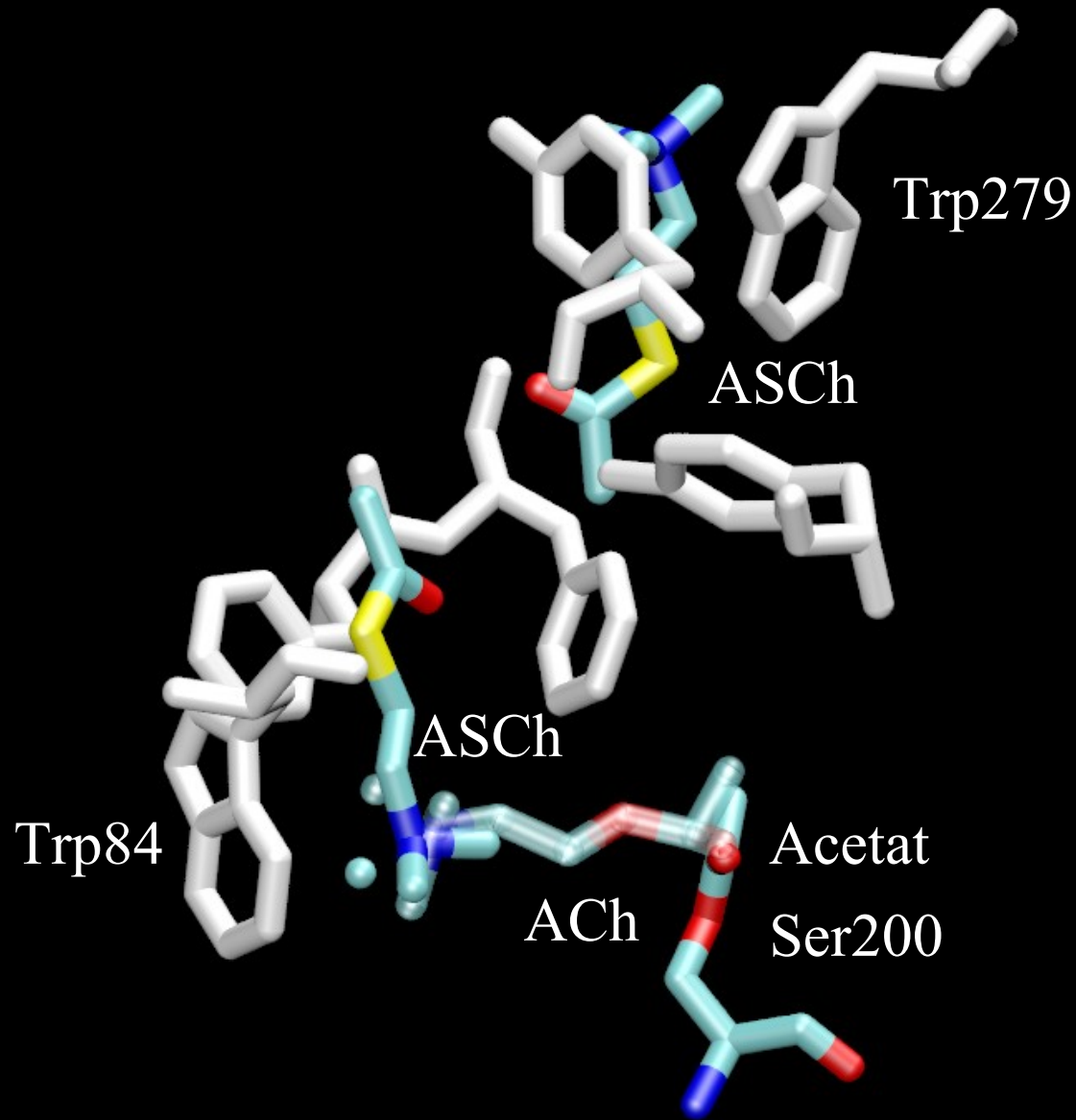
Primeri mehanizma encimske reakcije

Alosterični pojavi

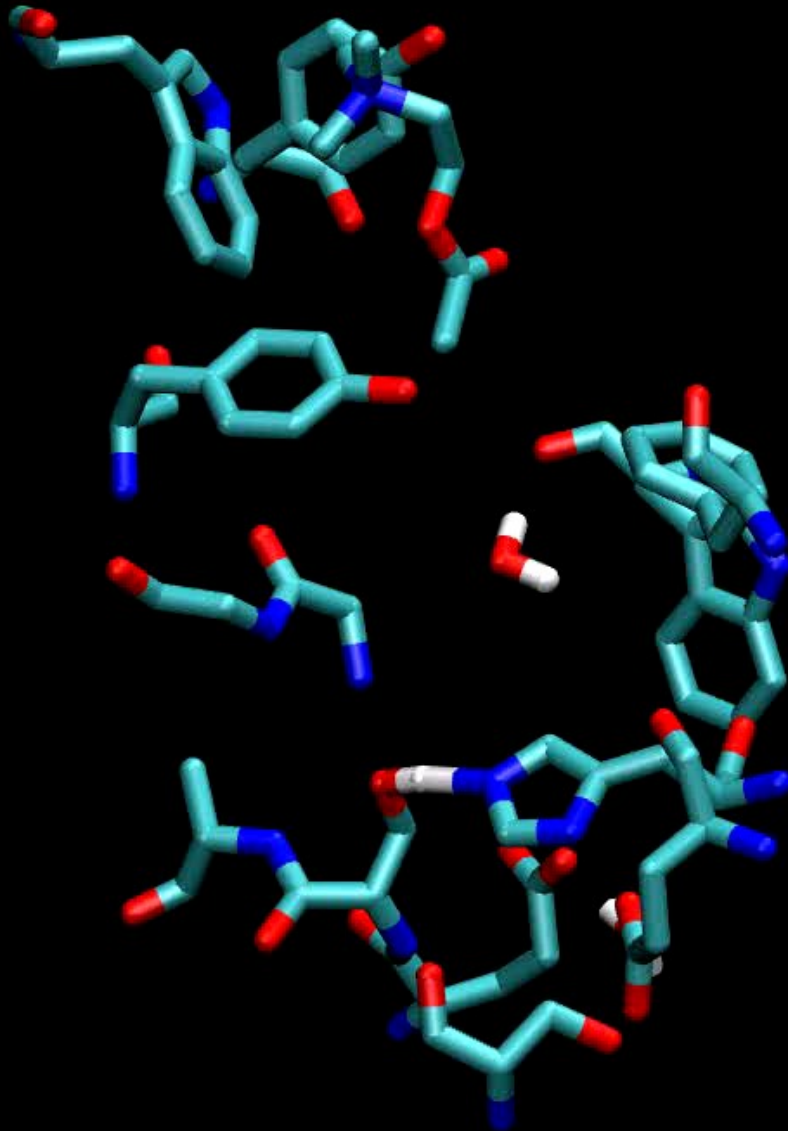
# Primeri katalitičnega delovanja



# Primeri katalitičnega delovanja

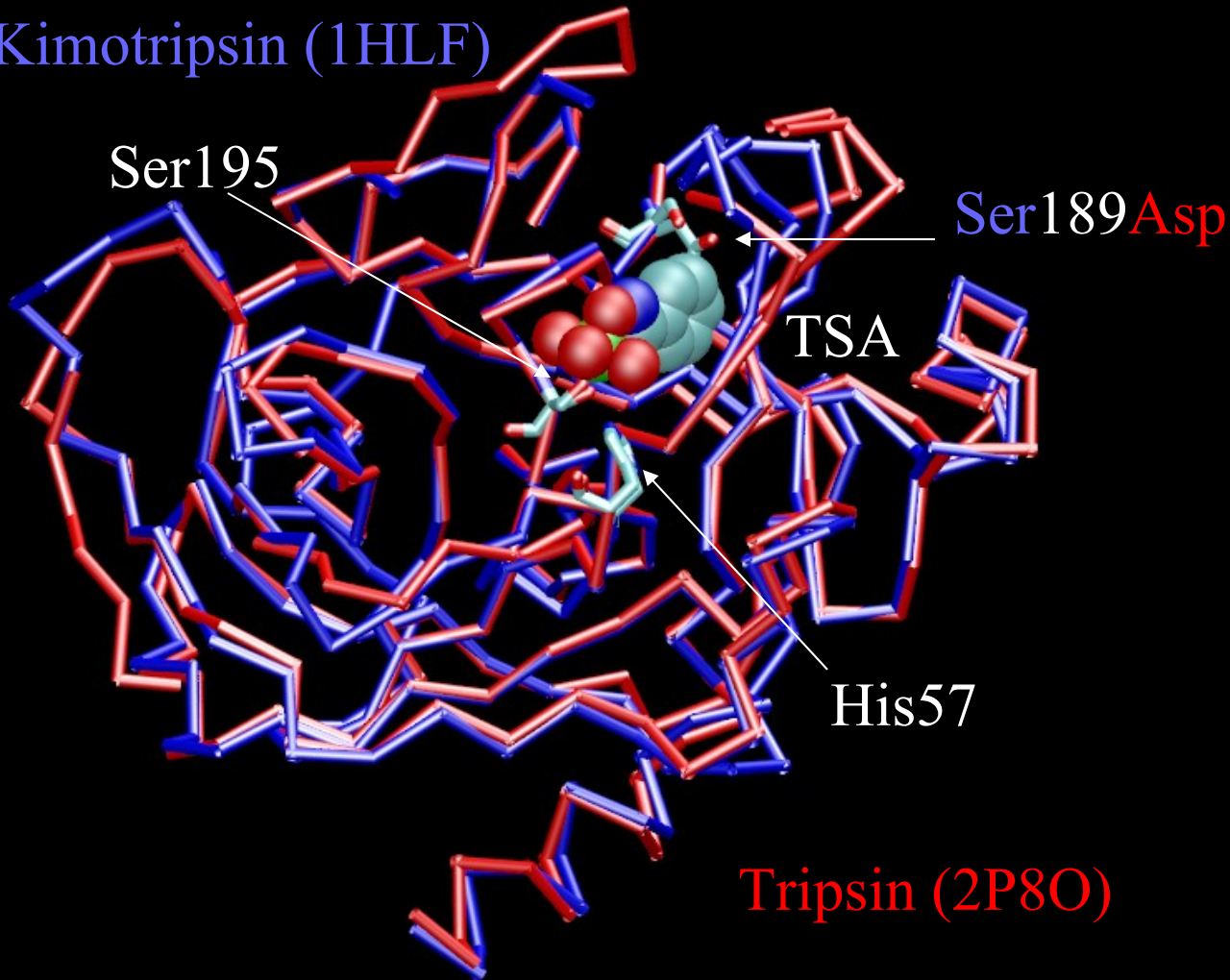


# Primeri katalitičnega delovanja



# Primeri katalitičnega delovanja

Kimotripsin (1HLF)



# Alosterični pojavi

1 Alosterija

2 Kooperativnost

3 Kinetika

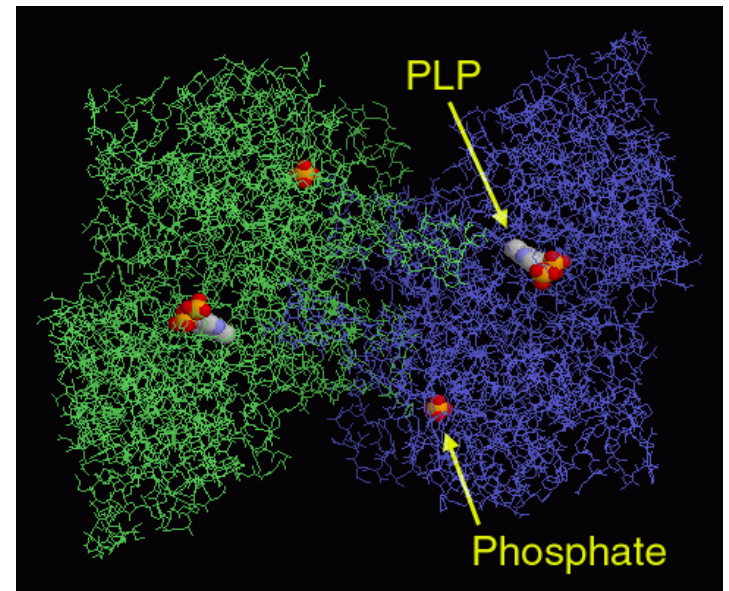
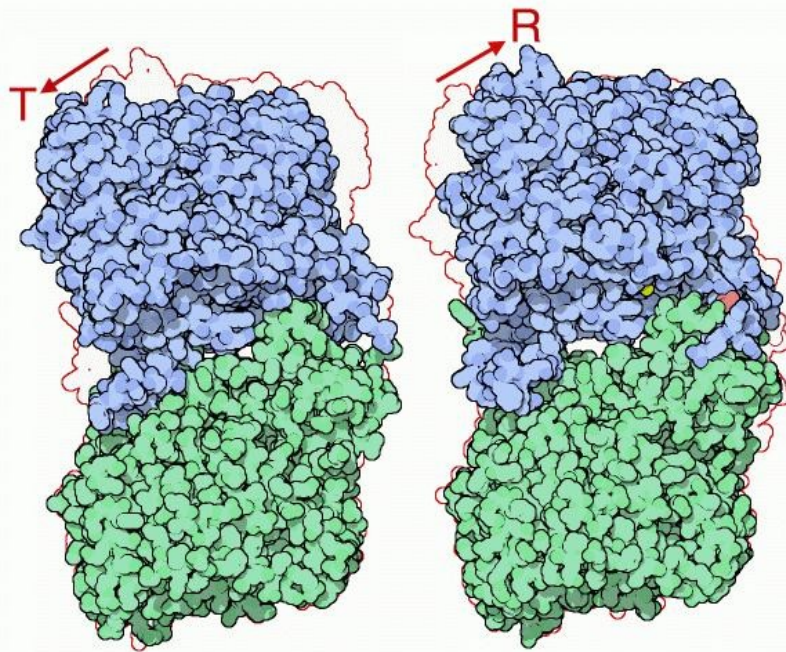
4 matematična formulacija

5 molekularni modeli

6 psevdokooperativnost

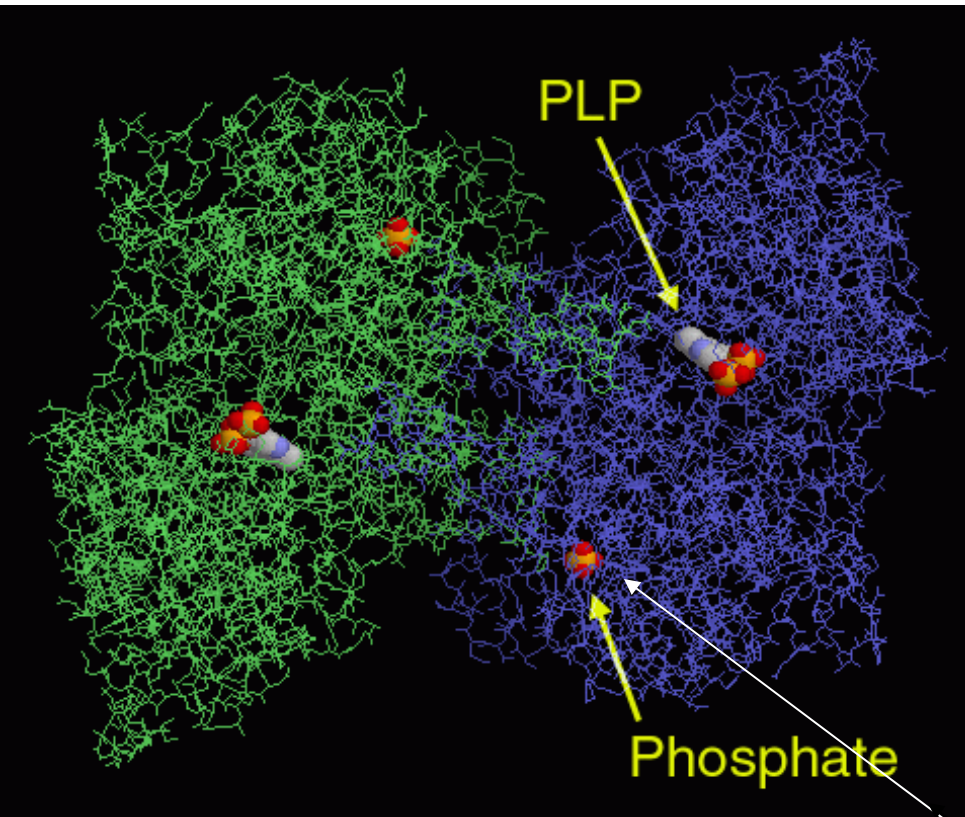
# Alsterični pojavi

1 Alsterija je pojav, pri katerem poteka kontrola (katalitske) funkcije z efektorji, ki se vežejo bolj ali manj DALEČ od aktivnega mesta

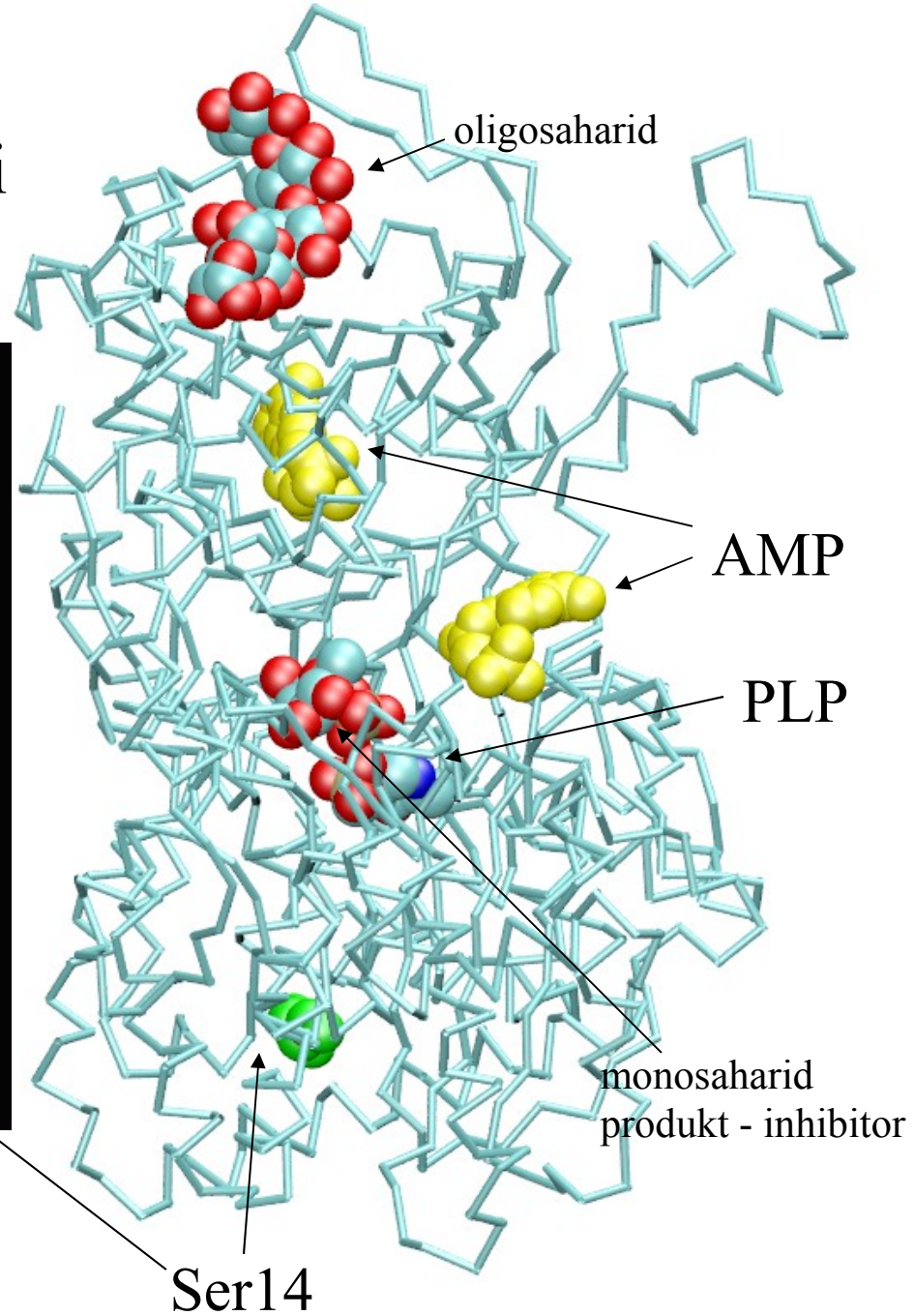


Glikogenska fosforilaza (1HLF)

# Alosterični pojavi



Glikogenska fosforilaza (1HLF)





# Alosterični pojavi

## 2 Kooperativnost je pojav, pri katerem je sistem sposoben vplivati sam nase

Substrat ali efektor s svojo vezavo povzroči **konformacijske spremembe** v polipeptidni verigi (**podenoti**), da le-te vplivajo na aktivna mesta **oligomernih proteinov** tako, da **se spremeni njegova funkcija ali katalitična sposobnost**

**homotropična - heterotropična** kooperativnost

Vpliv je takšen, da se delovanje sistema ojačuje ali duši:

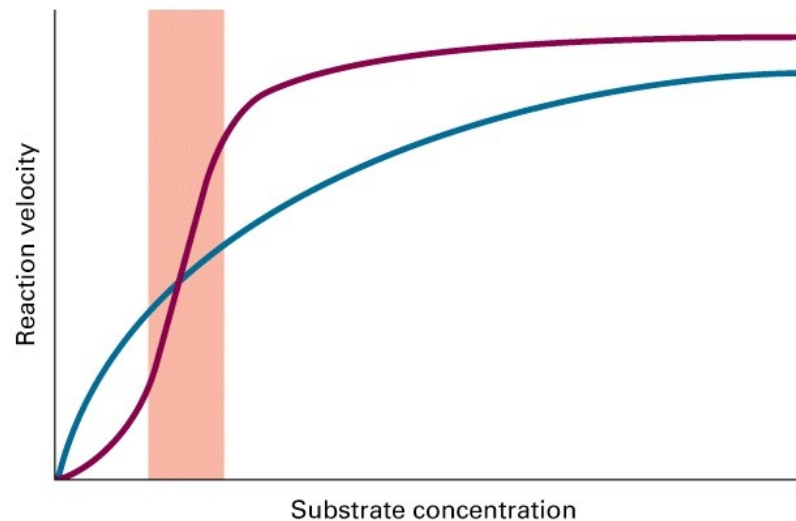
**pozitivna - negativna** kooperativnost

Vpliv je lahko na **vezavo** (K-sistemi, proteini in encimi) ali na **pretvorbo** (V-sistemi, encimi)

# Alosterični pojavi

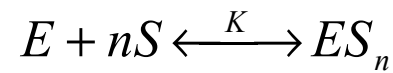
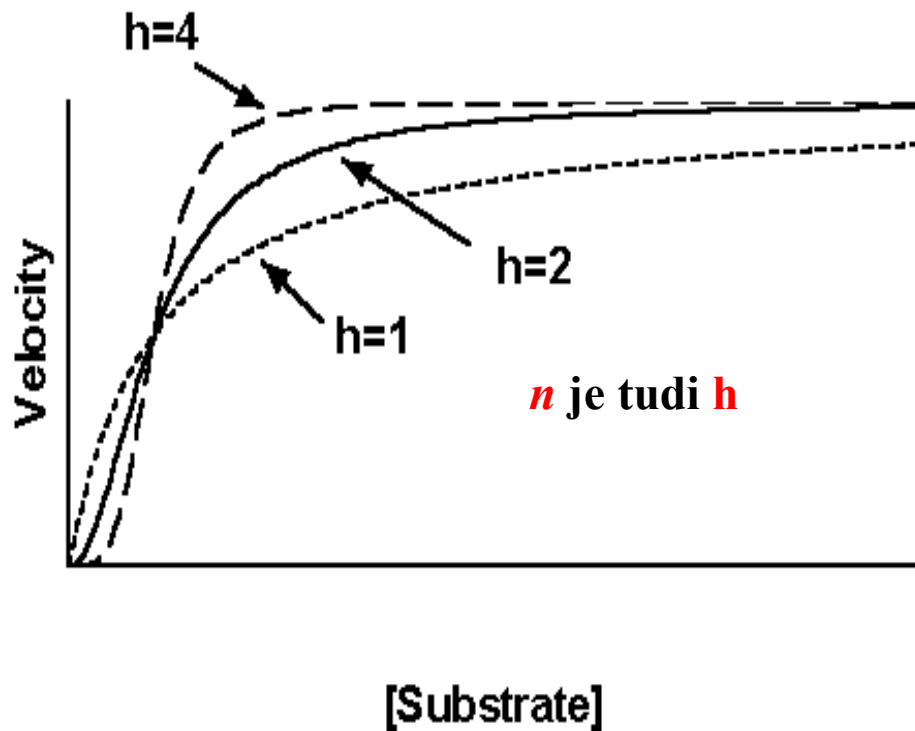
## 3 Kinetični aspekti delovanja alosteričnega encima

Odvisnost aktivnosti od koncentracije substrate je **sigmoidna**. Vzrok za tako obnašanje so medsebojni vplivi med polipeptidnimi verigami oligomernih encimov.



# Alosterični pojavi

4 Matematična formulacija delovanja alosteričnega encima



$$K = \frac{[E] * [S]^n}{[ES_n]}$$

$$\frac{[E]}{[ES_n]} = \frac{K}{[S]^n}$$

$$[E]_0 = [E] + [ES_n]$$

$$\frac{[E]_0 - [ES_n]}{[ES_n]} = \frac{K}{[S]^n}$$

$$\frac{[E]_0}{[ES_n]} - 1 = \frac{K}{[S]^n}$$

$$\frac{[E]_0}{[ES_n]} = 1 + \frac{K}{[S]^n}$$

$$\frac{[ES_n]}{[E]_0} = \frac{1}{1 + \frac{K}{[S]^n}}$$

$$\frac{[ES_n]}{[E]_0} = \frac{v}{V_{MAX}}$$

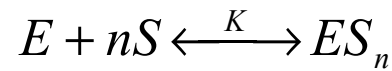
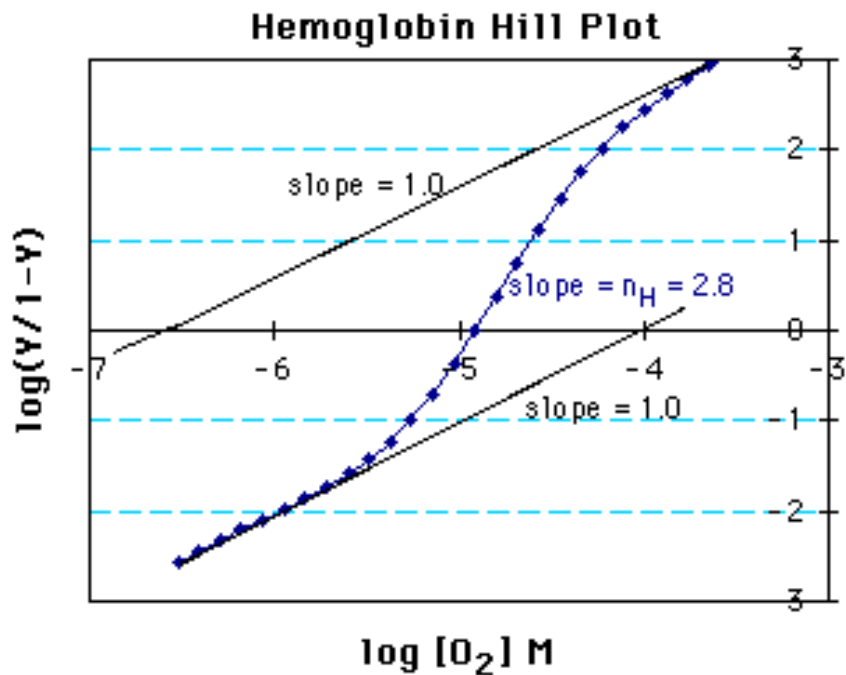
$$\frac{v}{V_{MAX}} = \frac{[S]^n}{[S]^n + K}$$

Enačba sigmoidne krivulje

$$v = \frac{V_{MAX} [S]^n}{[S]^n + K}$$

# Alosterični pojavi

Hill-ov koeficient 'n'



$$K = \frac{[E] * [S]^n}{[ES_n]}$$

$$\frac{[E]}{[EL_n]} = \frac{K}{[S]^n}$$

$$\frac{[E]_0 - [ES_n]}{[ES_n]} = \frac{K}{[S]^n}$$

$$1 - \frac{[EL_n]}{[E]_0} = \frac{K}{[S]^n}$$

$$\frac{v}{V_{MAX} - v} = \frac{[S]^n}{K}$$

$$[E]_0 = [E] + [ES_n]$$

$$/[E]_0$$

$$\frac{[ES_n]}{[E]_0} = \frac{v}{V_{MAX}}$$

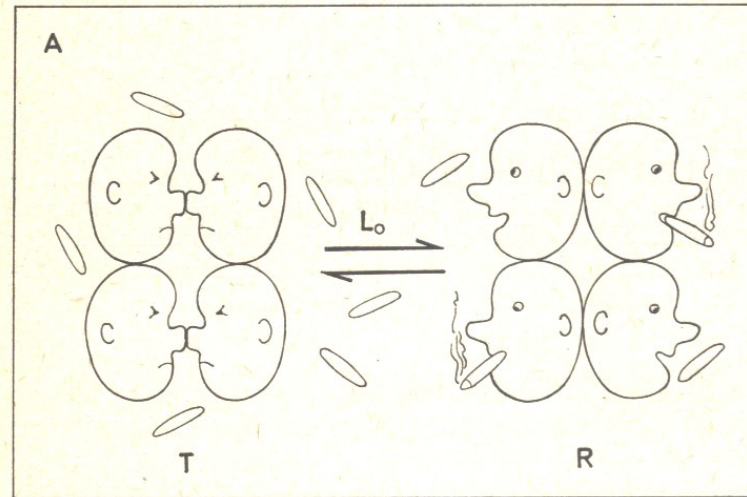
$$\frac{v}{V_{MAX} - v} = \frac{[S]^n}{K}$$

Hillova enačba

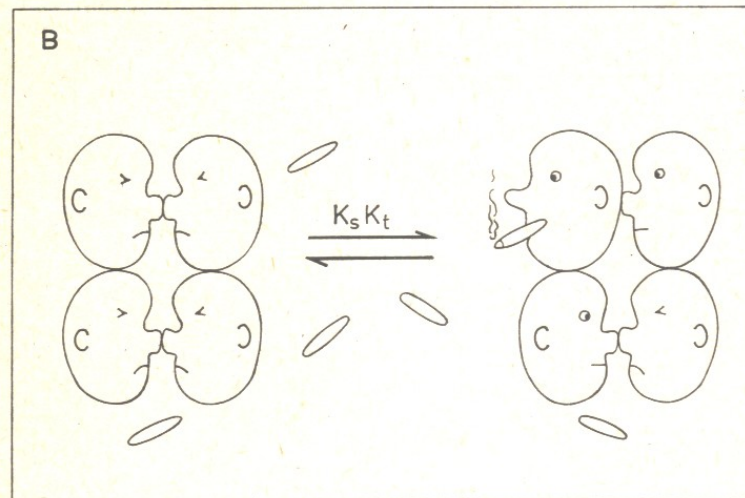
$$\log\left(\frac{v}{V_{MAX} - v}\right) = n * \log([S]) - \log(K)$$

# Alsterični pojavi

## 5 Molekulski modeli - **oligomerna sestava**



sočasni  
MWC



zaporedni  
AKNF

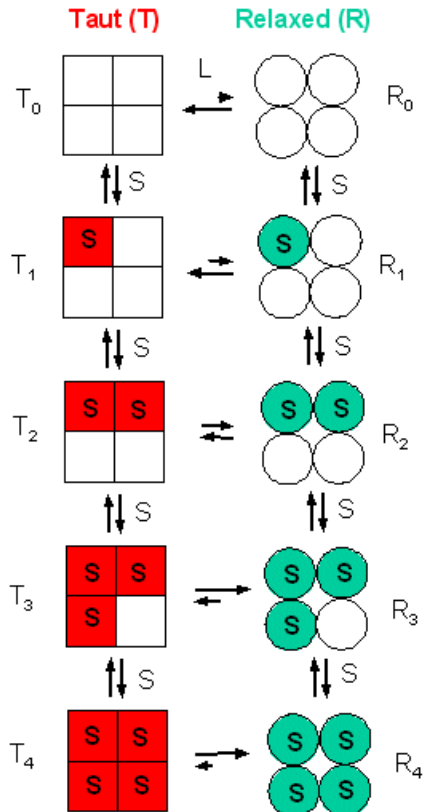
# Alosterični pojavi

## 5 Molekulski modeli

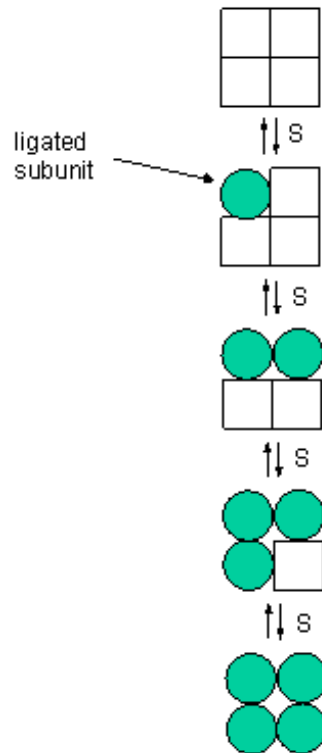
Adair-ova enačba

$$Y = \frac{K_1X + 2K_1K_2X^2 + 3K_1K_2K_3X^3 + 4K_1K_2K_3K_4X^4}{4(1 + K_1X + K_1K_2X^2 + K_1K_2K_3X^3 + K_1K_2K_3K_4X^4)}$$

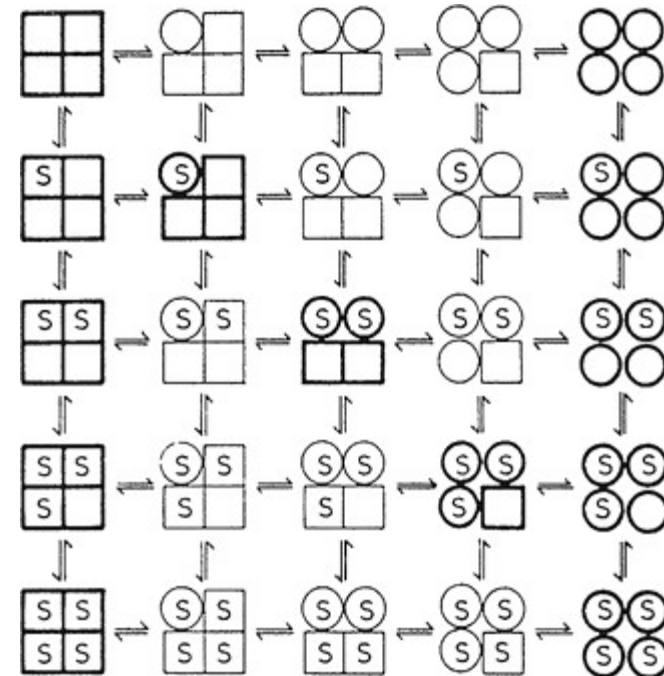
Monod-Wyman-Changeux



Adair-Koshland-Nemethy-Filmer



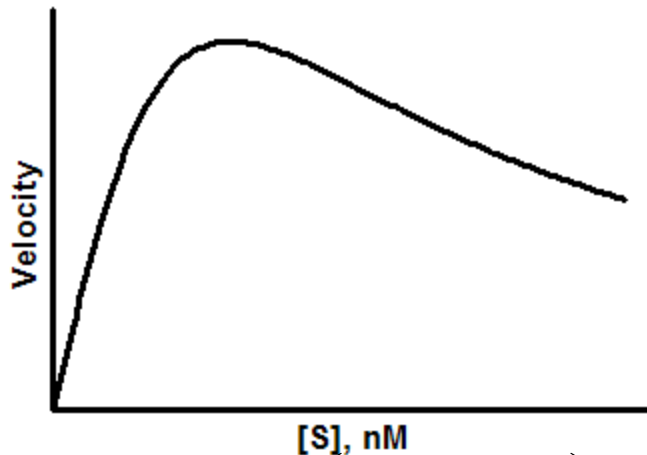
Splošen



# Alosterični pojavi

## 6 Pseudokooperativnost

Substrat ali efektor s svojo vezavo povzroči **spremembe**, ki vplivajo na aktivnost. Protein ni **oligomerem**.



$$v = \frac{V_{MAX} S \left( 1 + a \frac{S}{K_{si}} \right)}{K_s + S \left( 1 + \frac{S}{K_{si}} \right)}$$

