

Spis treści

Przedmowa	IX
1. WYBRANE ZAGADNIENIA CHEMII NIEORGANICZNEJ	1
1.1. Wprowadzenie	1
1.2. Niezbędne pierwiastki chemiczne	1
1.3. Metale w układach biologicznych: przegląd	3
1.4. Podstawy chemii nieorganicznej	6
1.5. Kompleksowanie jonów metali o znaczeniu biologicznym	8
1.5.1. Termodynamika	8
1.5.2. Kinetyka	9
1.6. Struktura elektronowa i geometryczna metali w układach biologicznych	13
1.7. Chemia biometaloorganiczna	19
1.8. Przeniesienie elektronu	23
1.9. Podsumowanie	27
Bibliografia	27
2. PODSTAWY BIOCHEMII	29
2.1. Wprowadzenie	29
2.2. Białka	30
2.2.1. Białka zbudowane są z aminokwasów	30
2.2.2. Struktura białek	33
2.2.3. Sekwencjonowanie białek i proteomika	40
2.2.4. Funkcje białek, enzymy i kinetyka enzymatyczna	44
2.3. Kwasy nukleinowe	47
2.3.1. Bloki budulcowe DNA i RNA	47
2.3.2. Molekularne struktury DNA i RNA	49
2.3.3. Przekazywanie informacji genetycznej	53
2.3.4. Mutacje genetyczne i ukierunkowana mutageniza	56
2.3.5. Geny i klonowanie	58
2.3.6. Genomika i genom ludzki	61
2.4. Białka z motywem palca cynkowego	63
2.4.1. Przykłady zastosowań	67
2.5. Podsumowanie i wnioski	74
Bibliografia	74

3. METODY INSTRUMENTALNE	76
3.1. Wstęp	76
3.1.1. Analityczne metody instrumentalne	76
3.1.2. Metody spektroskopowe	77
3.2. Spektroskopia absorpcyjna promieniowania rentgenowskiego (XAS i EXAFS)	78
3.2.1. Podstawy teoretyczne i sprzęt	78
3.2.2. Przykłady zastosowań	81
3.3. Rentgenowska analiza strukturalna	83
3.3.1. Wstęp	83
3.3.2. Krystalizacja i cechy kryształów	84
3.3.3. Teoria i aparatura	88
3.3.4. Przykłady zastosowań	96
3.4. Spektroskopia magnetycznego rezonansu jądrowego	98
3.4.1. Podstawy teoretyczne	98
3.4.2. Przesłanianie jąder i przesunięcie chemiczne	103
3.4.3. Sprężenie spinowo-spinowe	105
3.4.4. Techniki całkowania sygnałów spektralnych i rozprężania spinów	107
3.4.5. Zjawisko relaksacji magnetycznej jąder	108
3.4.6. Jądrowy efekt Overhausera (NOE)	109
3.4.7. Otrzymywanie widma NMR	111
3.4.8. Dwuwymiarowa (2D) spektroskopia NMR	112
3.4.9. Dwuwymiarowa spektroskopia korelacyjna NMR (COSY i TOCSY)	113
3.4.10. Spektroskopia jądrowego efektu Overhausera (NOESY)	116
3.4.11. Wielowymiarowa spektroskopia NMR	117
3.4.12. Przykłady zastosowań	118
3.5. Spektroskopia elektronowego rezonansu paramagnetycznego	124
3.5.1. Teoria i wyznaczanie wartości współczynnika g	124
3.5.2. Oddziaływania nadsubtelne i supernadsubtelne	129
3.5.3. Podwójny rezonans elektronowo-jądrowy oraz modulacja powłoki elektronowego echa spinowego	131
3.5.4. Przykłady zastosowań	131
3.6. Spektroskopia Mössbauera	134
3.6.1. Podstawy teoretyczne	134
3.6.2. Rozszczepienie kwadrupolowe i przesunięcie izomeryczne	136
3.6.3. Magnetyczne oddziaływania nadsubtelne	138
3.6.4. Przykłady zastosowań	139
3.7. Inne metody instrumentalne	142
3.7.1. Mikroskopia sił atomowych	142
3.7.2. Szybkie metody czasowo-rozdzielcze	145
3.7.3. Spektrometria mas	151
3.8. Podsumowanie i wnioski	157
Bibliografia	157
4. SPRZĘT KOMPUTEROWY, OPROGRAMOWANIE I METODY OBLICZENIOWE W CHEMII	160
4.1. Wprowadzenie do metod komputerowych	160
4.2. Sprzęt komputerowy (hardware)	160
4.3. Modelowanie molekularne i mechanika molekularna	164
4.3.1. Wprowadzenie do MM	164
4.3.2. Modelowanie Molekularne, Mechanika Molekularna i Dynamika Molekularna	165

4.3.3.	Modelowanie biomolekuł	169
4.3.4.	Przykład opisowy modelowania molekularnego	171
4.4.	Metody obliczeniowe oparte na mechanice kwantowej	174
4.4.1.	Wprowadzenie	174
4.4.2.	Metody <i>ab initio</i>	174
4.4.3.	Teoria funkcjonałów gęstości	175
4.4.4.	Metody półempiryczne	177
4.5.	Programy komputerowe przydatne w chemii	178
4.5.1.	Programy matematyczne	184
4.6.	Zasoby dostępne online w sieci world wide web	184
4.6.1.	Zasoby nomenklaturowe i wizualizacyjne	184
4.6.2.	Strony towarzystw naukowych, przeszukiwanie literatury online, strony internetowe poświęcone materiałom i wyposażeniu	187
4.7.	Podsumowanie i wnioski	189
	Bibliografia	189

5. METALE 1. I 2. GRUPY UKŁADU OKRESOWEGO W UKŁADACH BIOLOGICZNYCH: HOMEOSTAZA I BIOCZĄSTECZKI ZAWIERAJĄCE JONY METALI 1. GRUPY 192

5.1.	Wstęp	192
5.2.	Homeostaza metali i niektórych niemetalu	192
5.2.1.	Fosfor w postaci jonów ortofosforanowych(V)	193
5.2.2.	Jony potasu, sodu oraz chlorkowe	196
5.2.3.	Homeostaza wapnia	197
5.3.	Przenoszenie cząsteczek i jonów przez błony	198
5.3.1.	Dyfuzja bierna	198
5.3.2.	Dyfuzja ułatwiona	200
5.3.3.	Transport aktywny i pompy jonowe	201
5.4.	Białka zależne od potasu	202
5.4.1.	ATPaza $\text{Na}^+ - \text{K}^+$: Pompa sodowa	203
5.4.2.	Potasowe kanały jonowe	207
5.5.	Wnioski	239
	Bibliografia	239

6. METALE GRUPY 1. I 2. W UKŁADACH BIOLOGICZNYCH: GRUPA 2. 241

6.1.	Wprowadzenie	241
6.2.	Magnez i katalityczny RNA	241
6.2.1.	Wprowadzenie	241
6.2.2.	Analiza roli jonu metalu	244
6.2.3.	Rybozomy intronów grupy I	247
6.2.4.	Rybozym typu głowy młotka	266
6.3.	Cząsteczki zależne od wapnia	307
6.3.1.	Wprowadzenie	307
6.3.2.	Kalmodulina	308
6.4.	Przenoszenie fosforu: ATPazy typu P	333
6.4.1.	Wprowadzenie	333
6.4.2.	Wapniowe ATPazy typu P	333
6.5.	Wnioski	343
	Bibliografia	343

7. BIAŁKA I ENZYMY ZAWIERAJĄCE ŻELAZO	347
7.1 Wprowadzenie: białka zawierające żelazo z ligandami porfirynewymi	347
7.2. Mioglobina i hemoglobina	347
7.2.1. Mioglobina i hemoglobina — podstawy	349
7.2.2. Struktura hemowej grupy prostetycznej	350
7.2.3. Zachowanie ditlenu związanego z metalami	352
7.2.4. Struktura centrum aktywnego mioglobiny i hemoglobiny: porównanie ze związkami modelowymi	353
7.2.5. Uwagi o związkach kompleksowych	356
7.2.6. Związki modelowe zawierające żelazo	357
7.2.7. Wiązanie CO z mioglobina, hemoglobina i związkami modelowymi	360
7.2.8. Wnioski	362
7.3. Wprowadzenie do cytochromów	363
7.4. Cytochrom P450: monooksygenaza	365
7.4.1. Wprowadzenie	365
7.4.2. Cytochrom P450: struktura i funkcja	366
7.4.3. Cytochrom P450: mechanizm działania	369
7.4.4. Metody analityczne: rentgenowska analiza strukturalna	373
7.4.5. Modele cytochromu P450	376
7.4.6. Cytochrom P450. Podsumowanie	386
7.5. Cytochrom <i>b(6)f</i> : cytochrom roślinny	386
7.5.1. Wprowadzenie	386
7.5.2. Metalokofaktory cytochromu <i>b(6)f</i>	389
7.6. Cytochrom <i>bc₁</i> : cytochrom bakteryjny	391
7.6.1. Wprowadzenie	391
7.6.2. Struktura cytochromu <i>bc₁</i>	393
7.6.3. Metalokofaktory cytochromu <i>bc₁</i>	394
7.6.4. Cykl Q cytochromu <i>bc₁</i>	398
7.6.5. Inhibitory cytochromu <i>bc₁</i>	400
7.6.6. Cytochrom <i>bc₁</i> — podsumowanie	411
7.7. Cytochromy <i>c</i>	411
7.7.1. Wprowadzenie	411
7.7.2. Mitochondrialny cytochrom <i>c</i> (drożdże)	414
7.7.3. Mitochondrialny cytochrom <i>c</i> (serce konia)	419
7.7.4. Cytochrom <i>c</i> — pofałdowanie, przenoszenie elektronów i apoptoza komórki	425
7.7.5. Cytochrom <i>c</i> — podsumowanie	432
7.8. Oksydaza cytochromu <i>c</i>	432
7.8.1. Wprowadzenie	432
7.8.2. Miejsca wiązania metali w oksydazie cytochromu <i>c</i>	434
7.8.3. Wiązanie ditlenu, translokacja protonów i transport elektronów	436
7.8.4. Modele oksydazy cytochromu <i>c</i> i techniki analityczne stosowane w ich badaniu	443
7.8.5. Oksydaza cytochromu <i>c</i> — podsumowanie	455
7.9. Niehemowe białka zawierające żelazo	456
7.9.1. Wprowadzenie	456
7.9.2. Białka zawierające klaster żelazowo-siarkowy	457
7.9.3. Białka z wiązaniem żelazo-tlen	461
7.10. Wnioski	469
Bibliografia	469
SKOROWIDZ	477