

Expressões aproximadas usadas para descrição de forças intermoleculares em biomoléculas

Guilherme Menegon Arantes

garantes@iq.usp.br

<http://gaznevada.iq.usp.br>



Descrição aproximada das interações

- Mecânica quântica descreve interações perfeitamente, mas é impraticável para macromoléculas
- Pela teoria de forças intermoleculares, podemos descrever as interações em termos mais simples:

$$E = E_{pot} + E_{cin}$$

$$E_{pot} = \mathcal{V}_{covalente} + \mathcal{V}_{nao-ligante}$$

$$\mathcal{V}_{covalente} = \mathcal{V}_{lig} + \mathcal{V}_{ang} + \mathcal{V}_{died}$$

$$\mathcal{V}_{nao-ligante} = \mathcal{V}_{elet} + \mathcal{V}_{pol} + \mathcal{V}_{vdW}$$

- \mathcal{V}_{cov} : Termos ligantes ou covalentes
- \mathcal{V}_{non} : Termos não-ligantes ou intermoleculares



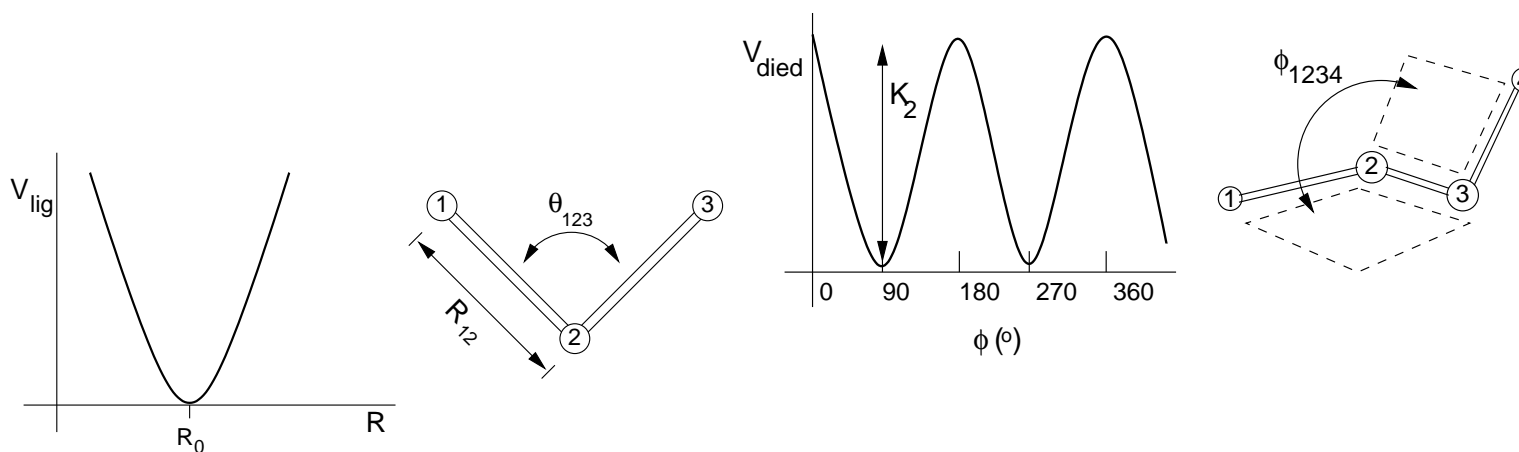
Forças covalentes

- Termos harmônicos: Ligação \mathcal{V}_{lig} e ângulo \mathcal{V}_{ang}

$$\mathcal{V}_{lig} = \sum_{lig} \frac{1}{2} k_m (R - R_0)^2$$

- Termo periódico: Ângulo diedral

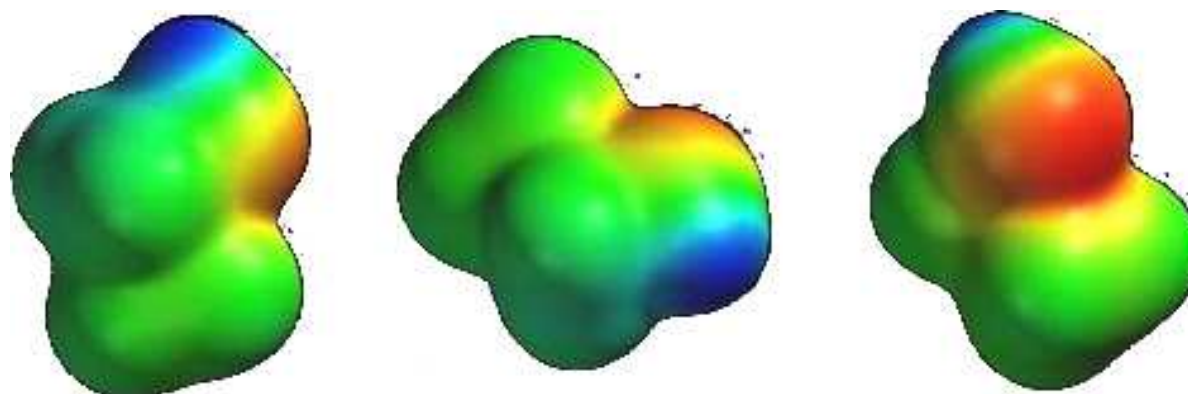
$$\mathcal{V}_{died} = \sum_{diedrais} \sum_{n=1}^4 \frac{1}{2} K_n [1 + \cos(n\phi - \delta)]$$



Forças eletrostáticas: \mathcal{V}_{elet}

$$\mathcal{V}_{elet} = \sum_{i < j} \frac{q_i q_j}{R_{ij}}$$

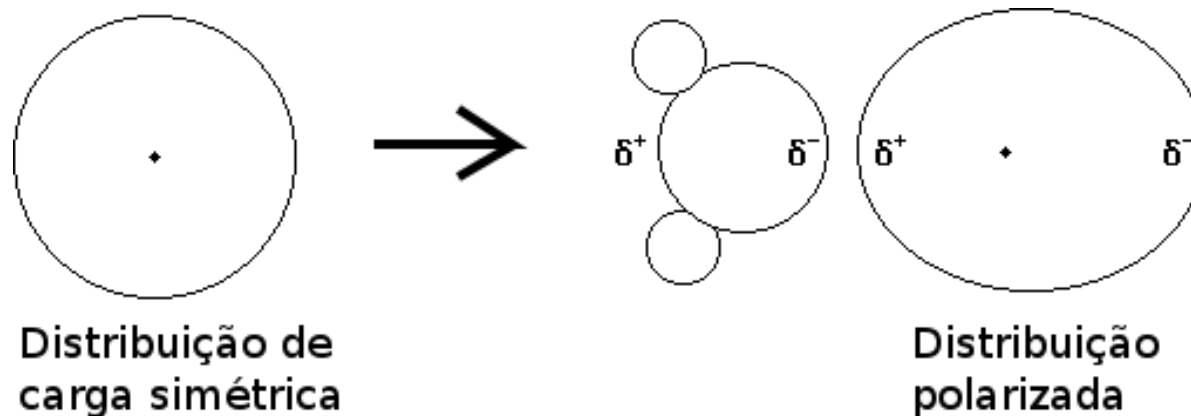
- Cargas parciais q_i e q_j aproximam a distribuição de carga da molécula
- Soma sobre pares de átomos i e j , R_{ij} é a distância entre os núcleos i e j
- Vejam a densidade de carga do etanol ($\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$):



Forças de polarização: \mathcal{V}_{pol}

$$\mathcal{V}_{pol} = \sum_{i < j} \frac{q_i^2 \alpha_j}{R_{ij}^6}$$

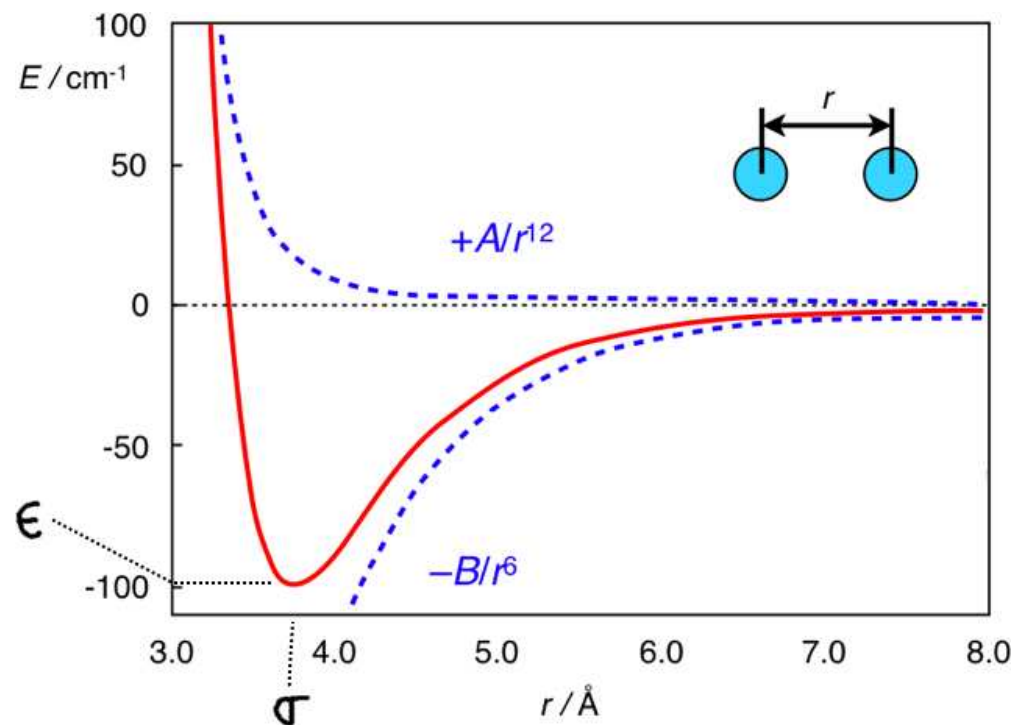
- Entre um dipolo permanente (com distribuição de carga q_i) e uma molécula apolar (com polarizabilidade α_j)
- Por exemplo, argônio (apolar) em contato água



Forças de van der Waals: \mathcal{V}_{vdW}

- Repulsivas (R^{-12}) e dispersivas ($e^{-R} \approx R^{-6}$). São usualmente descritas por potencial de Lennard-Jones:

$$\mathcal{V}_{LJ} = \sum_{i < j} \epsilon_{ij} \left[\left(\frac{\sigma_{ij}}{R_{ij}} \right)^{12} - 2 \left(\frac{\sigma_{ij}}{R_{ij}} \right)^6 \right]$$



Exemplos: Interações entre dímeros

