

Описание формы белков и их столкновений

При расчете столкновений белков используется описание формы белков с помощью набора сфер (рис. 1).

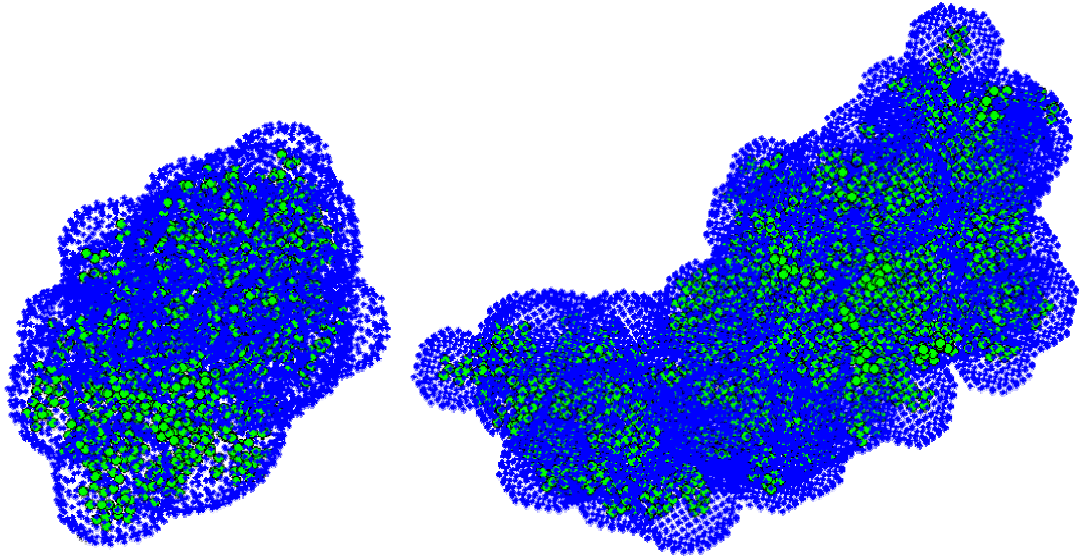


Рис. 1. Интерпретация молекул пластоцианина (слева) и цитохрома f (справа) наборами сфер.

Для того чтобы проверить факт столкновения двух молекул, необходимо определить, пересекаются ли соответствующие им наборы сфер. Геометрическая интерпретация молекулы с помощью небольшого количества (10–50) сфер, с одной стороны, обеспечивает достаточно реалистичное представление поверхности молекулы для расчета столкновений с другими молекулами, а с другой стороны, приемлемое время счета. Это связано с тем, что сфер мало (на два порядка меньше, чем атомов) и проверить столкновение двух сфер просто – достаточно знать их радиусы и координаты центров.