

الله  
بِسْمِ اللّٰهِ الرَّحْمٰنِ الرَّحِيْمِ

MRTsoft



## دانشگاه آزاد اسلامی

واحد شاهروд

دانشکده علوم پایه ، گروه شیمی  
پایان نامه برای دریافت درجه کارشناسی ارشد « M.sc. »

گرایش : شیمی فیزیک

عنوان :

بررسی ساختاری و ترمودینامیکی تری پپتید  $\text{HCO-Val-Gly-Gly-NH}_2$  با استفاده از  
محاسبات مکانیک کوانتومی

استاد راهنما :  
آقای دکتر بهزاد چهکندي

استاد مشاور :  
آقای دکتر جعفر ابوالی

نگارش :  
بهاره خوش بیان

تابستان ۱۳۹۰



## دانشگاه آزاد اسلامی

واحد شاهرود

دانشکده علوم پایه، گروه شیمی  
پایان نامه برای دریافت درجه کارشناسی ارشد « M.sc. »

عنوان :

بررسی ساختاری و ترمودینامیکی تری پپتید  $\text{HCO-Val-Gly-Gly-NH}_2$  با استفاده از  
محاسبات مکانیک کوانتومی

نگارش:  
بهاره خوش بیان

تابستان ۱۳۹۰

۱. دکتر بهزاد چهکندی

۲. دکتر جعفر ابولی

هیأت داوران :

۳. دکتر فرامرز طیاری

۴. دکتر احسان زاهدی

خدای را سپاس گویم تا باران نعمتش بیش از پیش فرو ریزد ، و اطاعت در پیشگاه عزّتش فزون گردد ، و جانم از معصیتش بیمه شود . و از آستان قدسش مدد خواهم تا «نداریم» را به مرز «بینیازی» رساند ، چه او دست هر کس گیرد راه گم نکند ، و آن که بر امواج دشمنی او نشیند به ساحل نجات نرسد ، و آن کس که در سایه سرپرستی او درآید فقری نبیند ، که اوست گران سنگترین ارزشها و برترین گنجینه‌ها .

#### امام علی (ع)

با تشکر از استاد راهنمای بزرگوار جناب آقای دکتر چهکندي و استاد مشاور محترم جناب آقای دکتر ابوی که همواره لطف بی دریغ این بزرگواران راه گشا برای پایانامه اینجانب بوده است . از خداوند متعال برای این دو استاد ارجمند سلامتی و سعادت روز افزون خواهانم .

مهربانی پدر از قله فراتر و مهربانی مادر از اقیانوس عمیق تر است

تقدیم به پدر و مادر عزیزم

## فهرست مطالب

صفحه	عنوان
۱	چکیده
۲	فصل اول
۳	۱-۱- مقدمه
۴	۱-۲- ساختار اسیدهای آمینه
۶	۱-۳- انواع اسیدهای آمینه
۶	۱-۳-۱- منو اسیدهای منو آمینه
۸	۱-۳-۲- اسید های آمینه الكل دار
۹	۱-۳-۳- اسید های آمینه گوگردار
۱۰	۱-۳-۴- دی اسید های منو آمینه
۱۱	۱-۴-۳- اسید های آمینه آمیدی
۱۲	۱-۶-۳- اسیدهای آمینه دی آمیدی
۱۳	۱-۷-۳- اسیدهای آمینه حلقوی
۱۵	۱-۴- طبقه بندی اسید های آمینه براساس گروه های R (اسیدآمینه های استاندارد)
۱۵	۱-۴-۱- گروه های R آلیفاتیک غیر قطبی
۱۵	۱-۴-۲- گروه های R آروماتیک
۱۵	۱-۴-۳- گروه های R بدون بار قطبی
۱۶	۱-۴-۴- گروه های R دارای بار مثبت (بازی)
۱۶	۱-۴-۵- گروههای R دارای بار منفی (اسیدی)
۱۶	۱-۵- تهیه اسید های آمینه
۱۷	۱-۱-۵-۱- روش هل- ولهارد- زلینسکی
۱۷	۱-۱-۵-۲- روش مالونیک استر
۱۷	۱-۶- نقطه ایزو الکتریک آمینواسیدها
۱۸	۱-۷- خواص شیمی فیزیکی اسیدهای آمینه
۱۸	۱-۷-۱- صورتیابی و خواص نوری در اسیدهای آمینه
۲۰	۱-۸- پیتیدها
۲۰	۱-۹- هیدرولیز پیتیدها
۲۰	۱-۹-۱- هیدرولیز پیتیدها توسط متادیمیابی
۲۱	۱-۹-۲- هیدرولیز پیتیدها توسط آنزیم
۲۲	۱-۱۰-۱- انواع ساختار پروتئین ها
۲۲	۱-۱۰-۱-۱- ساختار اول پروتئین ها
۲۲	۱-۱۰-۲- ساختار دوم پروتئین ها
۲۲	۱-۱۰-۱-۲-۱۰-۱- مارپیچ $\alpha$
۲۲	۱-۱۰-۲-۲-۱۰-۱- مارپیچ $\beta$
۲۳	۱-۱۰-۳-۲-۱۰-۱- Turn ها
۲۳	۱-۱۰-۳-۱۰-۱- ساختار سوم پروتئین ها
۲۳	۱-۱۰-۴- ساختار چهارم پروتئین ها
۲۴	۱-۱۱- پیوند هیدروژنی
۲۵	۱-۱۲-۱- الاستین پروتئین ضروری بدن

۱-۱۳- طرح راما چاندران	۲۵
فصل دوم	۲۸
۲- ۱- مقدمه	۲۹
۲- ۲- مطالعات انجام شده بر روی تری پیتیدها	۳۰
۲- ۳- مطالعات انجام شده بر روی دی پیتیدها	۳۸
فصل سوم	۴۴
۳- ۱- مقدمه	۴۵
۲- ۲- طبقه بندی روش های کوانتمی	۴۶
۲- ۳- ۱- روش محاسبات آغازین	۴۶
۲- ۳- ۲- روش هارتری فاک	۴۷
۲- ۳- ۲- ۱- روش هارتری فاک محدود شده (RHF) و غیر محدود شده (UHF)	۴۸
۲- ۳- ۲- ۲- روش هارتری همبستگی الکترون	۴۸
۲- ۳- ۴- توابع پایه	۴۹
۲- ۳- ۵- سری های پایه	۵۱
۲- ۳- ۶- روش های نیمه تجربی	۵۴
۲- ۳- ۷- روش اوربیتال مولکولی هوکل (HMO)	۵۴
۲- ۳- ۸- روش هوکل گسترش یافته (EHMO)	۵۵
۲- ۳- ۹- روش پاریز- پار- پویل (PPPMO)	۵۵
۲- ۳- ۱۰- روش اغماض کامل همپوشی دیفرانسیلی (CNDO)	۵۶
۲- ۳- ۱۱- روش اهمال متوسط از همپوشی دیفرانسیلی (INDO)	۵۶
۲- ۳- ۱۲- روش ابقاء نسبی همپوشی دیفرانسیلی دو اتمی (PRDDO)	۵۶
۲- ۳- ۱۳- روش اصلاح شده چشم پوشی متوسط از همپوشانی دیفرانسیل (MINDO)	۵۷
۲- ۳- ۱۴- روش اصلاح شده چشم پوشی از همپوشانی دیفرانسیلی دو اتمی (MNDO)	۵۷
۲- ۳- ۱۵- نظریه تابعیت چگالی (DFT)	۵۹
۲- ۳- ۱۶- نرم افزار های شیمی کوانتمی	۶۲
۲- ۳- ۱۷- Gaussian	۶۳
۲- ۳- ۱۸- Gamess	۶۳
۲- ۳- ۱۹- Columvus	۶۳
۲- ۳- ۲۰- Startan	۶۳
۲- ۳- ۲۱- Argus	۶۳
۲- ۳- ۲۲- Mopac	۶۳
۲- ۳- ۲۳- آینده شیمی کوانتمی	۶۴
۲- ۳- ۲۴- فصل چهارم	۶۵
۲- ۳- ۲۵- مقدمه	۶۶
۲- ۳- ۲۶- روش کار	۶۷
۲- ۳- ۲۷- تعیین پایدارترین مقدار برای زنجیره جانبی ( $\chi$ )	۶۸
۲- ۳- ۲۸- بررسی نقشه های راما چاندران	۸۴
۲- ۳- ۲۹- مقایسه تری پیتیدها	۱۵۹
۲- ۳- ۳۰- مقایسه تری پیتید تری پیتید $HCO-L-Val-Gly-Gly-NH_2$	۱۵۹
۲- ۳- ۳۱- مقایسه تری پیتید تری پیتید $HCO-D-Val-Gly-Gly-NH_2$	۱۶۰

۱۶۱	۳-۵-۴	مقایسه دو فرم L و D برای تری پپتید HCO-Val-Gly-Gly-NH <sub>2</sub>
۱۶۲	۴-۵-۴	مقایسه تری پپتید HCO-Gly-Gly-L-Val-NH <sub>2</sub>
۱۶۳	۵-۵-۴	مقایسه تری پپتید HCO-Gly-Gly-D-Val-NH <sub>2</sub>
۱۶۴	۶-۵-۴	مقایسه دو فرم L و D برای تری پپتید HCO-Gly-Gly-Val-NH <sub>2</sub>
۱۶۴	۷-۵-۴	مقایسه تری پپتید HCO-Gly-L-Val-Gly-NH <sub>2</sub>
۱۶۵	۸-۵-۴	مقایسه تری پپتید HCO-Gly-D-Val-Gly-NH <sub>2</sub>
۱۶۶	۹-۵-۴	مقایسه دو فرم L و D برای تری پپتید HCO-Gly-Val-Gly-NH <sub>2</sub>
۱۶۸		نتیجه گیری
۱۶۹		پیشنهادات
۱۷۰		فهرست منابع فارسی
۱۷۲		فهرست منابع غیرفارسی
۱۷۵		چکیده انگلیسی

## فهرست جدول ها

صفحه	عنوان
۵	جدول ۱-۱
۳۱	جدول ۱-۲
۳۱	جدول ۲-۲
۳۲	جدول ۲-۳
۳۲	جدول ۴-۲
۳۳	جدول ۵-۲
۳۳	جدول ۶-۲
۳۵	جدول ۷-۲
۳۵	جدول ۸-۲
۳۷	جدول ۹-۲
۳۸	جدول ۱۰-۲
۳۹	جدول ۱۱-۲
۴۱	جدول ۱۲-۲
۴۲	جدول ۱۳-۲
۴۲	جدول ۱۴-۲
۴۳	جدول ۱۵-۲
۴۳	جدول ۱۶-۲
۶۰	جدول ۱-۳
۶۹	جدول ۱-۴
۷۱	جدول ۲-۴
۷۳	جدول ۳-۴
۷۵	جدول ۴-۴
۷۷	جدول ۵-۴
۷۹	جدول ۶-۴
۹۰	جدول ۷-۴
۹۰	جدول ۸-۴
۹۱	جدول ۹-۴
۹۱	جدول ۱۰-۴
۹۲	جدول ۱۱-۴
۹۲	جدول ۱۲-۴
۹۳	جدول ۱۳-۴
۹۳	جدول ۱۴-۴
۹۴	جدول ۱۵-۴

٩٤	جدول -٤
٩٥	جدول -٤
٩٥	جدول -٤
٩٦	جدول -٤
٩٦	جدول -٤
٩٧	جدول -٤
٩٧	جدول -٤
٩٨	جدول -٤
٩٨	جدول -٤
١٠٠	جدول -٤
١٠٢	جدول -٤
١٠٢	جدول -٤
١٠٣	جدول -٤
١٠٣	جدول -٤
١٠٤	جدول -٤
١٠٤	جدول -٤
١٠٥	جدول -٤
١٠٥	جدول -٤
١٠٦	جدول -٤
١٠٦	جدول -٤
١٠٧	جدول -٤
١٠٧	جدول -٤
١٠٨	جدول -٤
١٠٨	جدول -٤
١٠٩	جدول -٤
١٠٩	جدول -٤
١١٠	جدول -٤
١١٠	جدول -٤
١١٢	جدول -٤
١١٤	جدول -٤
١١٤	جدول -٤
١١٥	جدول -٤
١١٥	جدول -٤
١١٦	جدول -٤
١١٦	جدول -٤
١١٧	جدول -٤

١١٧	جدول -٤
١١٨	جدول -٤
١١٨	جدول -٤
١١٩	جدول -٤
١١٩	جدول -٤
١٢٠	جدول -٤
١٢٠	جدول -٤
١٢١	جدول -٤
١٢١	جدول -٤
١٢٢	جدول -٤
١٢٢	جدول -٤
١٢٤	جدول -٤
١٢٦	جدول -٤
١٢٦	جدول -٤
١٢٧	جدول -٤
١٢٧	جدول -٤
١٢٨	جدول -٤
١٢٨	جدول -٤
١٢٩	جدول -٤
١٢٩	جدول -٤
١٣٠	جدول -٤
١٣٠	جدول -٤
١٣١	جدول -٤
١٣١	جدول -٤
١٣٢	جدول -٤
١٣٢	جدول -٤
١٣٢	جدول -٤
١٣٣	جدول -٤
١٣٣	جدول -٤
١٣٤	جدول -٤
١٣٤	جدول -٤
١٣٦	جدول -٤
١٣٨	جدول -٤
١٣٨	جدول -٤
١٣٩	جدول -٤
١٣٩	جدول -٤
١٤٠	جدول -٤

١٤٠	جدول - ٤	٨٨
١٤١	جدول - ٤	٨٩
١٤١	جدول - ٤	٩٠
١٤٢	جدول - ٤	٩١
١٤٢	جدول - ٤	٩٢
١٤٣	جدول - ٤	٩٣
١٤٣	جدول - ٤	٩٤
١٤٤	جدول - ٤	٩٥
١٤٤	جدول - ٤	٩٦
١٤٥	جدول - ٤	٩٧
١٤٥	جدول - ٤	٩٨
١٤٦	جدول - ٤	٩٩
١٤٦	جدول - ٤	١٠٠
١٤٧	جدول - ٤	١٠١
١٤٩	جدول - ٤	١٠٢
١٤٩	جدول - ٤	١٠٣
١٥٠	جدول - ٤	١٠٤
١٥٠	جدول - ٤	١٠٥
١٥١	جدول - ٤	١٠٦
١٥١	جدول - ٤	١٠٧
١٥٢	جدول - ٤	١٠٨
١٥٢	جدول - ٤	١٠٩
١٥٣	جدول - ٤	١١٠
١٥٣	جدول - ٤	١١١
١٥٤	جدول - ٤	١١٢
١٥٤	جدول - ٤	١١٣
١٥٥	جدول - ٤	١١٤
١٥٥	جدول - ٤	١١٥
١٥٦	جدول - ٤	١١٦
١٥٦	جدول - ٤	١١٧
١٥٧	جدول - ٤	١١٨
١٥٧	جدول - ٤	١١٩
١٥٨	جدول - ٤	١٢٠

## فهرست شکل ها

صفحه	عنوان
۴	شکل ۱-۱
۶	شکل ۲-۱
۷	شکل ۳-۱
۷	شکل ۴-۱
۷	شکل ۵-۱
۸	شکل ۶-۱
۸	شکل ۷-۱
۸	شکل ۸-۱
۹	شکل ۹-۱
۱۰	شکل ۱۰-۱
۱۰	شکل ۱۱-۱
۱۱	شکل ۱۲-۱
۱۱	شکل ۱۳-۱
۱۲	شکل ۱۴-۱
۱۲	شکل ۱۵-۱
۱۲	شکل ۱۶-۱
۱۳	شکل ۱۷-۱
۱۳	شکل ۱۸-۱
۱۴	شکل ۱۹-۱
۱۴	شکل ۲۰-۱
۱۴	شکل ۲۱-۱
۱۹	شکل ۲۲-۱
۲۴	شکل ۲۳-۱
۲۶	شکل ۲۴-۱
۲۷	شکل ۲۵-۱
۳۴	شکل ۱-۲
۳۶	شکل ۲-۲
۴۱	شکل ۳-۲
۶۸	شکل ۱-۴
۸۱	شکل ۲-۴
۸۱	شکل ۳-۴
۸۲	شکل ۴-۴
۸۲	شکل ۵-۴
۸۳	شکل ۶-۴
۸۳	شکل ۷-۴
۸۴	شکل ۸-۴
۸۶	شکل ۹-۴
۸۷	شکل ۱۰-۴
۸۸	شکل ۱۱-۴

١٥٩	شكل ١٢-٤
١٦٠	شكل ١٣-٤
١٦٢	شكل ١٤-٤
١٦٣	شكل ١٥-٤
١٦٤	شكل ١٦-٤
١٦٥	شكل ١٧-٤

## چکیده :

در این تحقیق کنفورماسیون های مختلف تری پپتید های  $\text{HCO-Val-Gly-Gly-NH}_2$ ,  $\text{HCO-Gly-Val-Gly-NH}_2$  و  $\text{HCO-Gly-Gly-Val-NH}_2$  در دو فرم L و D در فاز گاز مورد بررسی قرار گرفتند. محاسبات با استفاده از گوسین ۳۰۰۳ در سطح  $\text{G}^*/\text{B3LYP/6-31}$  انجام شد.

در ابتدا ساختارهای بھینه حاصل از چرخش زنجیر جانبی ( $\chi$ ) در فواصل  $30^\circ$  از  $360^\circ$  محاسبه شدند که سه مینیمم  $\chi = 60^\circ$  و  $\chi = 180^\circ$  و  $\chi = 300^\circ$  بدست آمدند و به ترتیب گوچ مثبت و آنتی و گوچ منفی نامگذاری شدند.

سپس محاسبات خود را در نقشه ی راماچاندران بر روی تری پپتیدهای مورد نظر در دو فرم L و D در حالاتی که زنجیر جانبی در گوچ منفی و گوچ مثبت و آنتی قرار داده شده است در سه حالت  $\beta_L-\beta_L-X$  و  $\beta_L-X-\beta_L$  در سطح محاسباتی  $\text{G}^*/\text{B3LYP/6-31}$  انجام دادیم. نتایج نشان می دهد که کنفورمر  $\beta_L\beta_L\beta_L$  در اکثر موارد پایدارترین کنفورمر می باشد.

همچنین با توجه به نتایج بدست آمده از کنفورمرهای بررسی شده در نقشه های راما چاندران برای دو فرم L و D مقایسه تری پپتیدها در این تحقیق برای این دو فرم نیز انجام شد و حالتی ای انتیومری مورد بررسی قرار گرفت.

# فصل اول

ساختار پروتئین ها

## ۱-۱- مقدمه :

پروتئین‌ها ، بخش بزرگی از بدن جانوران را تشکیل می‌دهند ، بخش‌های مختلف آن را در کنار هم نگاه می‌دارند ، و آن را اداره می‌کنند . تمامی پروتئین‌ها ، شامل پروتئین‌های موجود در قدیمی ترین رده های باکتریایی تا پیچیده ترین اشکال حیات ، از ۲۰ اسید آمینه یکسان ساخته شده اند که با توالی های مشخص خطی به طریق کووالان به یکدیگر متصل می‌باشند . پروتئین‌ها گروه بزرگی از ماکرومولکول‌ها هستند که پایه های اصلی تنوع در حیات می‌باشند و اغلب خصوصیات سلول‌ها و ارگانیسم‌ها توسط آن‌ها مشخص می‌شود . نام پروتئین از واژه یونانی پروتیوس<sup>۱</sup> ، به معنی اولین ، گرفته شده است . در میان تمام مواد شیمیایی ، پروتئین‌ها در صدر قرار دارند ، زیرا ماده حیات هستند . این ترکیبات پیچیده وزن مولکولی بسیار زیادی دارند و از نیتروژن ، کربن ، هیدروژن ، اکسیژن و گاهی گوگرد و فسفر تشکیل می‌شوند [۱] .

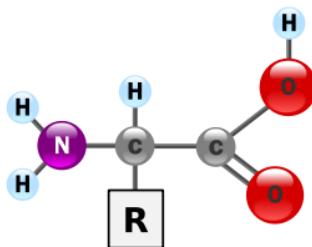
واحد های تشکیل دهنده پروتئین‌ها ، اسیدهای آمینه می‌باشند . در پروتئین‌ها ۲۰ نوع اسید آمینه موجود است که این اسیدهای آمینه قادراند تعداد نامحدودی از ترکیبات را بسازند . از آنجایی که هر کدام از این اسیدهای آمینه دارای زنجیر جانبی با خصوصیات شیمیایی متفاوت می‌باشند ، این گروه ۲۰ مولکولی پیش ساز را می‌توان به عنوان الفبای زبانی دانست که ساختمان پروتئین با آن نوشته می‌شود . پروتئین‌ها در تمام سلولهای زنده یافت می‌شوند . ماده اصلی پوست ، ماهیچه ، عصبها ، خون ، آنزیمهها ، پادتها و بسیاری از هورمونها هستند [۲] .

---

1. proteios

## ۱-۲- ساختار اسیدهای آمینه :

پروتئین ها قسمت اعظم بدن جانداران را تشکیل می دهند ، یک مولکول پروتئین واحد ، شامل صدها یا هزاران واحد آمینو اسید است . با روش های مختلف می توان پروتئین ها را توسط اجزا اسید آمینه ای تشکیل دهنده آنها تجزیه ( هیدرولیز ) نمود ؛ مطالعات اولیه پروتئین ها به طور طبیعی بر روی اسیدهای آمینه ای مرکز می باشد که از هیدرولیز آنها آزاد می شوند . اسید های آمینه نقش مهمی در ساخت واسطه های شیمیابی به عهده دارند و در موقع ضروری تجزیه شده و تولید انرژی می کنند . اسیدهای آمینه در سلول های زنده دارای اعمال و فعالیت های زیستی بسیار گوناگون و متنوعی می باشند . تمامی اسیدهای آمینه از نظر ساختمانی خصوصیات و ویژگی های مشترکی را دارا هستند . اسیدهای آمینه ترکیبات آلی هستند که دارای یک اتم کربن به نام کربن آلفا ( $\alpha$ ) که به چهار گروه شامل یک اتم هیدروژن ، یک گروه آمین ( $\text{NH}_2$ ) ، یک گروه اسید کربوکسیل (-COOH) و یک زنجیره جانبی به نام (R-) متصل می باشد . در تصویر ۱-۱ ساختمان عمومی یک اسید آمینه نمایش داده شده است [۳] .



شکل ۱-۱- ساختمان عمومی اسیدهای آمینه

اسیدهای آمینه آلفا فراوانترین اسیدهای آمینه میباشند ، که در آنها گروه آمین بر روی کربن آلفا قرار دارد . در اسیدهای آمینه بتا ، دلتا و گاما گروه آمین بترتیب بر روی کربن های بتا ، دلتا و گاما واقع است . بیشتر اسیدهای آمینه آلفا در سنتز پروتئین شرکت میکنند ، در صورتی که اسیدهای آمینه بتا ، گاما و دلتا واسطه های شیمیابی هستند ، منظور از واسطه های شیمیابی ماده ای است که در سنتز ملکول های دیگری که از نظر نقش بیوشیمیابی خود حائز اهمیت می باشند وارد می شوند .

۲۰ نوع اسیدآمینه با نسبت‌های مختلف در ساختمان اکثر پروتئین‌ها وجود دارند ، به این ۲۰ نوع اسیدآمینه که در ساخت پروتئین‌ها نقش بسیار مهم و شگرف دارند ، اسیدآمینه استاندارد می‌گویند که در جدول ۱-۱ به خوبی مشاهده می‌شود [۴]. برخی از این آمینو اسید‌ها (که با \* مشخص شده‌اند) اسیدهای آمینه ضروری می‌باشند که باید از راه تغذیه و مصرف مواد غذایی وارد بدن شوند.

جدول ۱-۱: آمینو اسیدهای استاندارد در ساختار پروتئین‌ها

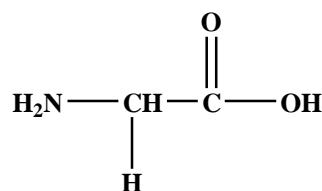
اسید آمینه	خلاصه سه حرفی	(علامت تک حرفی)	وزن مولکولی	درصد فراوانی در پروتئین
گلیسین	Gly	G	۷۵	۷/۲
آلانین	Ala	A	۸۹	۷/۸
پروولین	Pro	P	۱۱۵	۵/۲
والین	Val	V	۱۱۷	۶/۶
لوسین	Leu	L	۱۳۱	۹/۱
ایزو لوسین	Ile	I	۱۳۱	۵/۳
متیونین	Met	M	۱۴۹	۲/۳
فنیل آلانین *	Phe	F	۱۶۵	۳/۹
تیروزین	Tyr	Y	۱۸۱	۳/۲
تریپتوفان	Trp	W	۲۰۴	۱/۴
سرین	Ser	S	۱۰۵	۶/۸
ترؤونین	Thr	T	۱۱۹	۵/۹
سیستئین	Cys	C	۱۲۱	۱/۹
آسپاراژین	Asn	N	۱۳۲	۴/۳
گلوتامین	Gln	Q	۱۴۶	۴/۲
لیزین	Lys	K	۱۴۶	۵/۹
هیستیدین	His	H	۱۵۵	۲/۳
آرژنین	Arg	R	۱۷۴	۵/۱
آسپارتات	Asp	D	۱۳۳	۵/۳
گلوتامات	Glu	E	۱۴۷	۶/۳

برخی از این اسید های آمینه به طور طبیعی در پروتئین های طبیعی وجود دارند و نیازی به تهیه آنها از محیط بیرون نیست که به آنها اسیدهای آمینه غیرضروري گفته می شود . تعدادی از پروتئین ها علاوه بر بیست نوع اسیدهای آمینه اصلی شامل برخی از مشتقات آنها نیز می باشند . این مشتقات در جریان تشکیل زنجیرهای پپتیدی به وجود می آیند ، اینگونه مشتقات گذشته از نقش بسیار مشخص و دقیقی که در ساختمان پروتئین های مربوطه بر عهده دارند تنوع فعالیت های زیستی پروتئین ها را نیز بسیار افزایش می دهدن . که به آن ها اسید های آمینه غیر استاندارد می گویند . ۴-هیدروکسی پرولین (از مشتقات اسید آمینه استاندارد پرولین) ، ۵-هیدروکسی لیزین (از مشتقات اسید آمینه استاندارد لیزین) ، سلنوسیستئین ، اورنیتین و سیترولین نمونه ای از این قبیل اسیدهای آمینه می باشند . نوع اسیدهای آمینه ، نظم و ترتیب قرار گرفتن آنها در زنجیرهای پلی پپتیدی و وضعیت فضایی قرار گرفتن آنها نسبت به یکدیگر از عوامل اصلی در ایجاد ساختمان سه بعدی- فضایی و متعاقباً فعالیت های زیستی بسیار متنوع پروتئین های ساده و پروتئین های مرکب مانند هموگلوبین ، گلیکوپروتئین ها ، لیپوپروتئین ها و نوکلئوپروتئین ها می باشند [۵].

### ۱-۳- انواع اسیدهای آمینه :

#### ۱-۳-۱- منو اسیدهای منو آمینه :

۱- گلیکوکول (Gly) : گلیکوکول که گلیسین نیز نامیده می شود و تنها اسید آمینه ای است که فاقد کربن نا قرینه بوده و فاقد فعالیت نوری می باشد . در ساختمان پروتئین های مانند کلژن ، الاستین و میوزین به مقدار فراوان وجود دارد . به دلیل دارا بودن زنجیر جانبی هیدروژن ، دارای انعطاف پذیری بسیار بالا است .



شکل ۱ - ۲

۲- آلانین (Ala) : در تمام پروتئین ها فراوان است . بعد از اسید آمینه گلیسین ساده ترین اسید آمینه محسوب می- شود . این اسید آمینه در پروتئین های مارپیچ آلفا به فراوانی یافت می شود .