

كَلَامُ الْفَخْرِ



دانشگاه آزاد اسلامی

واحد شاهرود

دانشکده علوم پایه، گروه شیمی

پایان نامه برای دریافت درجه کارشناسی ارشد «M.Sc»

عنوان:

بررسی ساختاری و تعیین برخی توابع ترمودینامیکی کنفورمرهای مختلف تری پتید

Gly-Ser-Gly با استفاده از محاسبات مکانیک کوانتومی

استاد راهنما:

دکتر بهزاد چهکندی

استاد مشاور:

دکتر مجید محمدحسینی

نگارش:

کبری احمدی

زمستان ۱۳۸۹



بسمه تعالی

تعهد نامه اصالت رساله پایان نامه

اینجانب کیهان کورکچی دانش آموخته مقطع کارشناسی ارشد ناپیوسته / دکتری حرفه ای ادکترای تخصصی در رشته سینما و تئاتر که در تاریخ ۱۳۹۸/۰۵/۰۹ از پایان نامه خود تحت عنوان "بیماریهای روانی در تئاتر ایران: بررسی تطبیقی آثار سینمایی و تئاتری در ایران و آمریکا" با کسب نمره ۱۸/۱۸ و درجه دفاع نموده ام بدین وسیله متعهد می شوم:

- این پایان نامه رساله حاصل تحقیق و پژوهش انجام شده توسط اینجانب بوده و در مواردی که از دستاوردهای علمی و پژوهشی دیگران (اعم از پایان نامه، کتاب، مقاله و...) استفاده نموده ام، مطابق ضوابط و رویه موجود، نام منبع مورد استفاده و سایر مشخصات آن را در فهرست مربوطه ذکر و درج کرده ام.
- این پایان نامه رساله قبلاً برای دریافت هیچ مدرک تحصیلی (هم سطح، پایین تر یا بالاتر) در سایر دانشگاه ها و موسسات آموزش عالی ارائه نشده است.
- چنانچه بعد از فراغت تحصیل، قصد استفاده و هر گونه بهره برداری اعم از چاپ کتاب، ثبت اختراع و... از این پایان نامه داشته باشم، از حوزه معاونت پژوهشی واحد مجوزهای مربوطه را اخذ نمایم.
- چنانچه در هر مقطع زمانی خلاف موارد فوق ثابت شود، عواقب ناشی از آن را می پذیرم و واحد دانشگاهی مجاز است با این جانب مطابق ضوابط و مقررات رفتار نموده و در صورت ابطال مدرک تحصیلی ام هیچگونه ادعایی نخواهم داشت.

نام و نام خانوادگی
امضاء و تاریخ
کیهان کورکچی
۹۸/۴/۸

با احترام به

مولای عشق و علم و عدالت، حضرت علی علیه السلام که گفته هایش همیشه آرامش بخش و

دلیل امیدواریم بوده است

تقدیم به

زیبایی زندگی ام

مادر عزیزم

معنای بودنم

پدر مهربانم

همسفر لحظه هایم

همسر صبورم

دلیل ماندنم

فرزند دلبندم

سپاسگزاری

سپاس بیکران خدای را سزااست

که رحمانیتش بیکران و مهربانی اش بی حصر است

با سپاس از

اساتید گرامی و ارجمند

جناب آقای دکتر چهکندی و جناب آقای دکتر محمدحسینی که با لطف

فراوان همواره در مسیر تحقیقات

و ارائه این پروژه خالصانه هدایتگر و ارشاد کننده ام بوده اند.

چکیده:

در این تحقیق، کنفورماسیون های مدل تری پپتید Gly- Ser - Gly که در ساختار پلی پپتید مادر پروتئین فیبروئین می باشد، در اثر چرخش زنجیر جانبی و زوایای پیچشی اسکلت، در فاز گازی مورد مطالعه قرار گرفته است. همه محاسبات با استفاده از برنامه گوسین ۲۰۰۳ و با بهره گیری از سطوح تئوری HF با سری پایه ۶-۳۱G(d) و ۶-۳۱۱⁺⁺G(d, f) و سطح B₃LYP با سری پایه ۶-۳۱G(d) انجام شده است.

ابتدا ساختارهای بهینه و انرژی برای کنفورماسیون های حاصل از چرخش زاویه (χ)، به فواصل ۳۰° از صفر درجه تا ۳۶۰° محاسبه شدند که سه مینیم در $\chi = -۹۰$ و $\chi = ۱۸۰$ و $\chi = ۶۰$ بدست آمد. سپس برای کنفورماسیون های حاصل از چرخش زوایای پیچشی اسکلت ساختارهای بهینه، انرژی و مقادیر ترمودینامیکی انرژی آزاد گیبس، آنتالپی و آنتروپی در فواصل ۳۰° از صفر تا ۳۶۰° محاسبه شدند که این محاسبات بر روی کنفورمر پایدارتر ($\chi = -۹۰$) حاصل از چرخش (χ) انجام گرفت. هنگامی که $\Phi_1 = ۳۰$ ، $\Psi_1 = ۳۰$ ، Φ_2 ، Ψ_2 و $\Phi_3 = ۱۸۰$ بودند پایدارترین حالت بدست آمد اما در مورد زوایای پیچشی $\Phi_1 = ۳۰$ و $\Psi_1 = ۳۰$ بودند پایدارترین حالت یافت شد که به علت وجود زنجیره جانبی سرین می باشد.

همچنین ساختارهای بهینه، انرژی و توابع ترمودینامیکی کنفورمرهای حاصل از چرخش زوایای دو وجهی آمینواسید مرکزی (سرین) طبق نقشه رامانچاندران در هر سه حالت ($\chi = -۹۰$)، ($\chi = ۱۸۰$) و ($\chi = ۶۰$) در سطح B3LYP و سری پایه ۶-۳۱G(d) محاسبه شدند که کنفورمر $\beta_L\beta_L\beta_L$ در هر سه حالت پایدارترین کنفورمر یافت شد.

با توجه به نتایج، می توان چنین گفت که: جاذبه دو قطبی - دو قطبی و ایجاد پیوند هیدروژنی، همچنین آنتروپی در پایداری کنفورمرهای معین دی آمیدهای آمینواسید نقش اساسی ایفا می کنند.

کلمات کلیدی: کنفورماسیون- پلی پپتید- فیبروئین- زنجیر یابی- گوسین- کنفورمر- انرژی آزاد گیبس- آنتالپی- آنتروپی- زوایای پیچشی- نقشه ی رامانچاندران- جاذبه ی دو قطبی- دو قطبی- پیوند هیدروژنی- کنفورمر پایدار

فهرست مطالب

عنوان.....	صفحه.....
چکیده.....	۱.....
فصل اول: کلیات تحقیق	
۱-۱- مقدمه.....	۳.....
۲-۱- آمینو اسیدها و ساختار آنها.....	۴.....
۳-۱- انواع آمینو اسیدها.....	۵.....
۴-۱- دسته بندی آمینو اسیدها.....	۷.....
۵-۱- پیکربندی آمینو اسیدهای طبیعی.....	۹.....
۶-۱- نقطه ی ایزوالکتریک آمینو اسید.....	۱۰.....
۷-۱- تهیه ی آمینو اسیدها.....	۱۱.....
۸-۱- پپتیدها و وضعیت هندسی پیوند پپتیدی.....	۱۳.....
۹-۱- تعیین ساختار پپتیدها و آنالیز باقیمانده پایانه ای.....	۱۴.....
۱۰-۱- سطوح ساختاری تعیین کننده شکل پروتئین.....	۱۵.....
۱-۱۰-۱- ساختار اول.....	۱۷.....
۲-۱۰-۱- ساختار دوم.....	۱۷.....
۳-۱۰-۱- مارپیچ آلفا.....	۱۸.....

18 ۱-۱۰-۲ (ب) صفحه‌های بتا
19 ۱-۱۰-۲ (ج) Turn ها
20 ۱-۱۱- طرح رامچاندران
2۲ ۱-۱۲- طبقه بندی پروتئین ها
2۲ ۱-۱۳- کارکرد پروتئین ها
2۲ ۱-۱۴- ساختار ابریشم
2۲ ۱-۱۴- الف) ساختار اولیه
23 ۱-۱۴- ب) ساختار ثانویه

فصل دوم: تحقیق پیرامون پپتیدها

25 ۲-۱- مقدمه
26 ۲-۲- تحقیقات پیرامون دی پپتیدها
3۳ ۲-۳- تحقیقات پیرامون تری پپتیدها

فصل سوم: روش اجرای تحقیق

60 ۳-۱- مقدمه
60 ۳-۲- مکانیک مولکولی
61 ۳-۳- روش های ساختار الکترونی
62 ۳-۳-۱- روش های محاسبات آغازین
62 ۳-۳-۱-۱- تقریب هارتری - فاک
65 ۳-۳-۱-۲- تفاوت روش آغازین و نیمه تجربی
65 ۳-۳-۱-۳- همبستگی
6۶ ۳-۳-۱-۴- نظریه اختلال مولر - پلست
67 ۳-۳-۱-۵- برهمکنش پیکربندی (CI)
68 ۳-۳-۱-۶- میدان خود سازگار چند آریشی

- 68 ۷-۱-۳-۳ برهمکنش پیکربندی چند مرجعي
- 69 ۸-۱-۳-۳ کلاستر مزدوج
- 70 ۹-۱-۳-۳ روش هاي مونت کارلوي کوانتومي
- 70 ۱۰-۱-۳-۳ اربیتال هاي طبيعي
- 71 ۲-۳-۳ روش هاي نیمه تجربي
- 72 ۱-۲-۳-۳ هوکل
- 72 ۲-۲-۳-۳ هوکل بسط یافته
- 72 PPP -۳-۲-۳-۳
- 73 CNDO-۴-۲-۳-۳
- 73 MINDO-۵-۲-۳-۳
- 73 MNDO -۶-۲-۳-۳
- 74 INDO -۷-۲-۳-۳
- 74 ZINDO -۸-۲-۳-۳
- 74 SINDO1 -۹-۲-۳-۳
- 74 PRDDO-۱۰-۲-۳-۳
- 75 AM1-۱۱-۲-۳-۳
- 75 PM3 -۱۲-۲-۳-۳
- 76 PM3/TM -۱۳-۲-۳-۳
- 76 ۱۴-۲-۳-۳ فنسکي - هال
- 76 TNDO-۱۵-۲-۳-۳
- 76 SAM1-۱۶-۲-۳-۳
- 77 ۱۷-۲-۳-۳-تنوري گوسين
- 77 ۱-۱۷-۲-۳-۳ روش GI

78 ۲-۱۷-۲-۳-۳-۳ روش G2
79 ۳-۱۷-۲-۳-۳-۳ نظریه (G3) برای اتمهای ردیف اول و دوم.
81 ۳-۱۷-۲-۳-۳-۳ توصیف نظریه گاسی- 3
85 ۳-۱۷-۲-۳-۳-۳ ارزیابی نظریه G3 در مجموعه تست G2/97
92 ۳-۱۷-۲-۳-۳-۳ مقایسه نظریه های G2 و G3
93 ۳-۱۷-۲-۳-۳-۳ ارزیابی ویژگی های جدید نظریه G3
93 ۳-۱۷-۲-۳-۳-۳ مجموعه های پایه
94 ۳-۱۷-۲-۳-۳-۳ تصحیح سطح بالاتر
95 ۳-۱۷-۲-۳-۳-۳ همبستگی مرتبط با هسته
95 ۳-۱۷-۲-۳-۳-۳ زمانبندی ها
99 ۳-۳-۳-۳ نظریه تابع چگال
100 ۳-۴-۳-۳ نظریه پایه
102 ۳-۴-۳-۳ روش های مقیاس بندی خطی
103 ۳-۴-۳-۳ ملاحظات عملی
104 ۳-۴-۳-۳ توصیه ها
104 ۳-۳-۳-۳ توابع پایه
107 ۳-۵-۳-۳ سری های پایه
109 ۳-۵-۳-۳ توصیه ها
109 ۳-۴-۳-۳ آینده شیمی کوانتومی
	فصل چهارم: تجزیه و تحلیل داده ها
112 ۴-۱-۱ مقدمه
112 ۴-۲-۲ روش کار
112 ۴-۳-۳ تعیین کنفورمسیون های حاصل از چرخش زنجیر جانبی χ

122	۴-۴- تعیین کنفورماسیون های حاصل از چرخش زوایای دو وجهی اسکلت
123	۴-۴-۱- توابع ترمودینامیکی و پایداری
175	۴-۴- تعیین برخی از کنفورماسیون های تری پپتید GLY-SER-GLY
188	نتیجه گیری
189	منابع
189	فهرست منابع فارسی
190	فهرست منابع انگلیسی
195	چکیده لاتین

فهرست جداول

عنوان.....	صفحه
جدول (۱-۱). علایم ۲۰ اسید آمینه ی مهم.....	۶
جدول (۱-۲). انرژی نسبی و انرژی بر حسب Hartree	27
جدول (۲-۲). انرژی بر حسب Hartree و Kcal/mol	29
جدول (۳-۲). انرژی بر حسب Hartree و Kcal/mol	29
جدول (۴-۲). انرژی بر حسب Hartree و Kcal/mol	29
جدول (۵-۲). انرژی بر حسب Hartree و Kcal/mol	30
جدول (۶-۲). نتایج پایین ترین انرژی پتانسیل مینیم شده برای هر دی پپتید	30
جدول (۷-۲). رشته های تکرار شونده مواد الاستومری بر پایه پروتئین طبیعی شامل دی پپتید ..	33
جدول (۸-۲). مقادیر انرژی الکتریکی، آنتالپی، انرژی آزاد گیبس و آنتروپی	34
جدول (۹-۲). کنفورماسیون های بهینه شده.....	35
جدول (۱۰-۲). زوایای دو وجهی کنفورماسیون های بهینه شده	37
جدول (۱۱-۲). مقادیر طول پیوند C-H و زوایا پیوندی N-C α -CO تری پپتید	39
جدول (۱۲-۲). مقادیر طول پیوند C-H و زوایا پیوندی N-C α -CO تری پپتید	40
جدول (۱۳-۲). مقادیر زوایای دو وجهی، ممان دو قطبی، انرژی، آنتالپی، انرژی آزاد گیبس	42
جدول (۱۴-۲). پپتیدهای ساخته شده با غبار روی تحت تابش ریز موج	44
جدول (۱۵-۲). پارامترهای ژئومتری.....	57
جدول (۱-۳). انرژی کل G3 گونه های اتمی و تصحیح اسپین اربیت	86
جدول (۲-۳). انحراف های آنتالپی G3 پتانسیل یونیزاسیون الکترون خواهی و پروتون خواهی ..	88
جدول (۳-۳). انحراف های آنتالپی G3 پتانسیل یونیزاسیون الکترون خواهی و پروتون خواهی .	89
جدول (۴-۳). نتایج به دست آمده برای الکترون افینیتیه ها بر حسب Kcal/mol.....	90
جدول (۵-۳). خلاصه ای از انحرافهای مطلق میانگین و انحراف های ریشه میانگین مجذور ...	91

91	جدول (۶-۳). اثر تغییرات مختلف بر نظریه ی G2.....
92	جدول (۷-۳). انحراف مقادیر محاسبه شده و تجربی پروتون خواهی.....
96	جدول (۸-۳). مقایسه CPU TIME.....
102	جدول (۹-۳). انواع روش های DFT.....
115	جدول (۱-۴). مقادیر انرژی و انرژی نسبی حاصل از بهینه سازی کنفورمرها در سطح HF.....
116	جدول (۲-۴). مقادیر انرژی و انرژی نسبی حاصل از بهینه سازی کنفورمرها در سطح B3LYP.....
119	جدول (۳-۴ الف). مقادیر برخی از زوایای دو وجهی و زاویه پیوندی در سطح HF/6-31G(d).....
120	جدول (۳-۴ ب). مقادیر برخی از زوایای دو وجهی و زاویه پیوندی در سطح HF/6-311++G**.....
121	جدول (۴-۴). مقادیر برخی از زوایای دو وجهی و زاویه پیوندی در سطح B3LYP(6-31G*).....
126	جدول (۵-۴). مقادیر انرژی در سطح HF/6-31G(d).....
129	جدول (۶-۴). مقادیر در سطح B3LYP/6-31G(d).....
136	جدول (۷-۴). مقادیر در سطح HF/6-31G(d).....
137	جدول (۸-۴). مقادیر انرژی در سطح B3LYP/6-31G(d).....
143	جدول (۹-۴). مقادیر انرژی در سطح HF/6-31G(d).....
144	جدول (۱۰-۴). مقادیر انرژی در سطح B3LYP/6-31G(d).....
151	جدول (۱۱-۴). مقادیر انرژی در سطح HF/6-31G(d).....
152	جدول (۱۲-۴). مقادیر انرژی در سطح B3LYP/6-31G(d).....
159	جدول (۱۳-۴). مقادیر انرژی در سطح HF/6-31G(d).....
160	جدول (۱۴-۴). مقادیر انرژی در سطح B3LYP/6-31G(d).....
167	جدول (۱۵-۴). مقادیر انرژی در سطح HF/6-31G(d).....
168	جدول (۱۶-۴). مقادیر انرژی در سطح B3LYP/6-31G(d).....
177	جدول (۱۷-۴). مقادیر زوایای دو وجهی کنفورمرهای مربوط به نقشه رامچاندران.....
180	جدول (۱۸-۴). مقادیر انرژی در سطح B3LYP/6-31(d).....

- جدول (۴-۱۹). مقادیر انرژی در سطح B3LYP/6-31(d) 180
- جدول (۴-۲۰). مقادیر انرژی در سطح B3LYP/6-31(d) 181
- جدول (۴-۲۱). انرژی آزاد در سطح B3LYP/6-31(d) 182
- جدول (۴-۲۲). انرژی آزاد در سطح B3LYP/6-31(d) 182
- جدول (۴-۲۳). انرژی آزاد در سطح B3LYP/6-31(d) 183
- جدول (۴-۲۴). مقادیر زوایای پیچشی Ψ_2 و Φ_2 در سطح B3LYP/6-31(d) 185

فهرست نمودارها

عنوان.....	صفحه
نمودار (۱-۴). مقادیر انرژی نسبی در سطح HF/6-31g*	117
نمودار (۲-۴). مقادیر انرژی نسبی در سطح HF/6-311++g**	117
نمودار (۳-۴). مقادیر انرژی نسبی در سطح B3LYP/6-31G*	118
نمودارهای (۴-۴). مقادیر انرژی بر حسب تغییرات زاویه ی Φ_1	130
نمودارهای (۵-۴). مقادیر انرژی بر حسب تغییرات زاویه ی Ψ_1	138
نمودارهای (۶-۴). مقادیر انرژی بر حسب تغییرات زاویه ی Φ_2	145
نمودار های (۷-۴). مقادیر انرژی بر حسب تغییرات زاویه ی Ψ_2	151
نمودار های (۸-۴). مقادیر انرژی بر حسب تغییرات زاویه ی Φ_3	161
نمودارهای (۹-۴). مقادیر انرژی بر حسب تغییرات زاویه ی Ψ_3	170

فهرست شکل ها

عنوان.....	صفحه
شکل (۱-۱). الف). ساختار پایه ی اسیدهای آمینه؛ ب). انانتیومرهای اسید آمینه ی آلانین.....	5
شکل (۱-۲). تعیین پیکربندی اسیدهای آمینه	5
شکل (۱-۳). انواع گروه R در ساختار آمینو اسید ها	9
شکل (۱-۴). مقایسه پیکربندی L-(-) گلیسر آلدهید و L-آمینو اسید	۱۰
شکل (۱-۵). ایجاد پیوند پپتیدی	13
شکل (۱-۶). وضعیت هندسی اتصال پپتیدی پیوند کربن – نیتروژن	۱۴
شکل (۱-۷). سطوح ساختاری در پروتئین ها	16
شکل (۱-۸). مارپیچ آلفا	17
شکل (۱-۹). صفحه های بتا	18
شکل (۱-۱۰). صفحات β ، یک صفحه ی β دو رشته ای ساده با رشته های β ناهمسو	19
شکل (۱-۱۱). طرح رامچاندران	20
شکل (۱-۱۲). طرح رامچاندران (مارپیچ آلفا؛ مارپیچ کولازن؛ صفحه چین خورده بتا)	21
شکل (۲-۱). منحنی انرژی پتانسیل در کنفورماسیون های کشیده در تابعی از χ^1	26
شکل (۲-۲). منحنی انرژی پتانسیل در کنفورماسیون های پیچشی در تابعی از χ^1	27
شکل (۲-۳). تصویر قیاسی دی پپتید در چهار کنفیگوراسیون متفاوت آن	28
شکل (۲-۴). ساختار آمینو اسید پرولین	31
شکل (۲-۵). سطح انرژی پتانسیل های آزاد در طول پیچش Ψ در فاز گاز	31
شکل (۲-۶). سطح انرژی پتانسیل در طول پیچش زاویه Ψ در فاز آب	32
شکل (۲-۷). سطح انرژی پتانسیل در طول پیچش زاویه Ψ در فاز کلروفرم	32
شکل (۲-۸). نمایش زوایای پیچشی در تری پپتید	34
شکل (۲-۹). سیستم نامگذاری استاندارد بکار برده شده در تری پپتید	35

- شکل (۲-۱۰). نمایش سطح انرژی پتانسیل نقشه رامچاندران 36
- شکل (۲-۱۱). دو مدل مختلف تری پپتید 38
- شکل (۲-۱۲). ساختار ابتدایی تری پپتید 41
- شکل (۲-۱۳). دو مدل ساختاری تری پپتید 42
- شکل (۲-۱۴). دو ساختار مختلف برای تری پپتید شامل متیونین 43
- شکل (۲-۱۵). ساختار پری پپتید و زوایای پیچشی 45
- شکل (۲-۱۶). نقشه ی رامچاندران به دست آمده برای تری پپتید محافظت شده 45
- شکل (۲-۱۷). ساختار ابتدایی و نمایش زوایای پیچشی 46
- شکل (۲-۱۸). مقادیر نسبی ترمودینامیکی نسبت به کنفورمر $\beta L\beta L\beta L$ تری پپتید 47
- شکل (۲-۱۹). ایجاد برش عرضی و طولی در نقشه ی رامچاندران 48
- شکل (۲-۲۰). شکل شماتیک اثرات دو قطبی- دو قطبی 49
- شکل (۲-۲۱). شکل شماتیک برهمکنش های جاذبه و دافعه ی دو قطبی- دو قطبی 50
- شکل (۲-۲۲). توپولوژی دو بعدی نقشه رامچاندران 51
- شکل (۲-۲۳). توپولوژی سه بعدی PEHS رامچاندران 52
- شکل (۲-۲۴). نمودار شماتیک از PES و دیگرام دو بعدی سطوح انرژی رامچاندران 53
- شکل (۲-۲۵). سطوح انرژی پتانسیل سه وجهی رامچاندران 54
- شکل (۲-۲۶). ساختار کنفورمر تری پپتیدها 55
- شکل (۲-۲۷). ساختار تری پپتید 56
- شکل (۲-۲۸). ایجاد پل نمکی در اثر برهمکنشهای بین بارهای مثبت و منفی 56
- شکل (۲-۲۹). دو کنفورمر RGD بدون و با کاتیون Ca^{2+} 58
- شکل (۳-۱). مدل آرایش الکترون ها اطراف هسته یک اتم 65
- شکل (۳-۲). نتایج ممکن از افزایش درجه محاسبات مولر - پلست 66
- شکل (۳-۳). میانگین انحراف مطلق تجربی برای نظریه G2 در سری تست G2/97 80

- شکل (۳-۴). مقایسه مجموعه های مبنای به کار رفته در مراحل مختلف نظریه های G2 و G3 ... 83
- شکل (۳-۵). انحراف های مطلق میانگین با آزمایش برای نظریه G3 در مجموعه تست G2/97 98
- شکل (۳-۶). هیستوگرام از انحراف های G2 و G3 برای مجموعه تست G2/97 99
- شکل (۳-۷). نمایش تیزه در تابع موج حالت پایه اتم هیدروژن 105
- شکل (۳-۸). توابع اسلیتری و گوسینی برای اربیتال 1s 106
- شکل (۳-۹). سری پایه STO-3G برای اربیتال 1s و شمایی از یک تابع اسلیتری 108
- شکل (۴-۱). ساختار کلی تری پیتید مورد مطالعه 112
- شکل (۴-۲). سیستم شماره گذاری استاندارد بکار رفته تری پیتیدو 112
- شکل (۴-۳). پایدارترین کنفورمر بهینه شده به همراه تصویر نیومن آن 114
- شکل های (۴-۴). کنفورمرهای بهینه شده حاصل از تغییرات ۳۰۰ ای زاویه ی Φ_1 124
- شکل های (۴-۵). کنفورمرهای بهینه شده حاصل از تغییرات ۳۰۰ ای زاویه ی Ψ_1 132
- شکل های (۴-۶). کنفورمرهای بهینه شده حاصل از تغییرات ۳۰۰ ای زاویه ی Φ_2 140
- شکل های (۴-۷). کنفورمرهای بهینه شده حاصل از تغییرات ۳۰۰ ای زاویه ی Ψ_2 147
- شکل های (۴-۸). کنفورمرهای بهینه شده حاصل از تغییرات ۳۰۰ ای زاویه ی Φ_3 155
- شکل های (۴-۹). کنفورمرهای بهینه شده حاصل از تغییرات ۳۰۰ ای زاویه ی Ψ_3 166
- شکل (۴-۱۰). طرح نقشه رامانچاندران مربوط به یک باقیمانده آمینواسید 175
- شکل (۴-۱۱). تصاویر کنفورمرهای بهینه شده ی تری پیتید در حالت $\chi = -90^\circ$ 178
- شکل (۴-۱۲). تصاویر کنفورمرهای بهینه شده ی تری پیتید در حالت $\chi = 180^\circ$ 179
- شکل (۴-۱۳). تصاویر کنفورمر های بهینه شده ی تری پیتید در حالت $\chi = 60^\circ$ 179
- شکل (۴-۱۴). نقشه ی رامانچاندران تری پیتید در حالت $\chi = -90^\circ$ 183
- شکل (۴-۱۵). نقشه ی رامانچاندران تری پیتید در حالت $\chi = 180^\circ$ 183
- شکل (۴-۱۶). نقشه ی رامانچاندران تری پیتید در حالت $\chi = 60^\circ$ 184

فصل اول

کلیات تحقیق

۱-۱) مقدمه:

واژه ی پروتئین برای نخستین بار در اواسط قرن نوزدهم به همه ی مواد آلی پیچیده نیترورژن دار در سلول اطلاق شد. مولدر، شیمیدان هلندی، در آن زمان چنین نوشت: «در سلول های موجودات زنده ، ترکیباتی وجود دارند که بدون آنها زندگی ممکن نیست. این ترکیبات پروتئین نامیده می شوند.» پروتئین از واژه ی یونانی Protos به معنی اولیه، گرفته شده است و این بیانگر اهمیت این مولکول ها در سلول هاست.

پروتئین ها بسیار متنوع اند و نقش های گوناگون در سلول ایفا می کنند. هر نوع پروتئین، شکل و ساختاری متناسب با فعالیت خود را دارد. پروتئین ها واکنش های شیمیایی را سرعت می بخشند، از ترکیبات اصلی ساختار غشاهای سلول هستند و در ترابری مواد از غشای سلول نقش عمده دارند، جزء ساختار اغلب بخش های سلول همچون اسکلت سلولی در سلول های یوکاریوتی هستند، در انواع فرایند های پویای سلولی مانند انقباض ماهیچه ها شرکت می کنند و در تنظیم فرایندهای ژنتیک نیز دخالت دارند. علاوه بر این ، بسیاری از هورمون ها، ملکول های دستگاه ایمنی و برخی ملکول های ذخیره ای مانند آلبومین در تخم مرغ و کازئین در شیر پروتئین هستند. خلاصه این که پروتئین ها به نحوی در تمام فرایند های سلولی نقش دارند.

اولین مطالعات زیست شناسی شیمیایی بر پروتئین ها تقریباً یک قرن پیش توسط دانشمند آلمانی امیل فیشر انجام گرفت. او پیشنهاد کرد همه ی پروتئین ها زنجیره هایی از واحد های کوچک تر هستند. او این واحد های کوچکتر را اسید آمینه نامید. فیشر در سال ۱۹۰۲ برای تحقیقات ارزنده ی خود در این زمینه، جایزه ی نوبل را دریافت کرد. اسیدهای آمینه در پروتئین در یک ردیف و بدون انشعاب قرار دارند. شکل و عمل هر پروتئین در محیط سلول به تعداد ، نوع و توزیع اسیدهای آمینه ی سازنده ی آن بستگی دارند.

از لحاظ شیمیایی، پروتئینها، بسپارهای سنگین هستند. پروتئین ها، پلی آمیدهایی هستند که تکپارهای تشکیل دهنده ی آنها، α -آمینوکرَبوکسیلیک اسیدها می باشند. یک مولکول پروتئین، شامل صدها یا حتی هزاران واحد آمینواسید است؛ این واحدها، می توانند از آمینواسیدهای بیست و یک گانه باشند. شمار ترکیبهای مختلف، یعنی شمار مولکولهای متفاوت پروتئین، تقریباً نامتناهی است. به احتمال زیاد،