

## شبیه سازی دینامیک مولکولی پروتئین های غشایی

حسین خبازخوب

مرکز تحقیقات بیوشیمی و بیوفیزیک، دانشگاه تهران، تهران، ایران

( این مقاله در مجموعه سمینارهای تحصیلات تکمیلی بیوفیزیک در نیمسال دوم ۹۶-۹۵ ارائه گردید )

### چکیده

**مقدمه:** پروتئین های غشایی شامل ترانسپورترها، کانال ها و گیرنده ها، با کنترل ترافیک در دو سوی غشای سلولی و برقراری سیستم انتقال پیام، نقشی کلیدی در سیستم های زیستی ایفا می کنند. تعیین ساختار و مکانیسم عمل این پروتئین ها، همواره یک چالش بوده است. تکنیک های شبیه سازی دینامیک مولکولی با پیشرفت های اخیر خود، می توانند رفتار مولکول های زیستی را در سطح اتمی زیر ذره بین قرار داده و شناخت بیشتری از مکانیسم های زیست-مولکولی فراهم کند که مشاهده شان به صورت تجربی مشکل است.

**بحث:** شبیه سازی دینامیک مولکولی ابزاری شبیه به میکروسکوپ اتمی برای پژوهشگران فراهم کرده است که بوسیله آن می توانند فعالیت و ساختار پیچیده پروتئین های غشایی و فرایندهایی مانند نفوذ یک یون به کانال پروتئینی، تغییرات کانفورماسیونی وسیع ترانسپورترها و همچنین تأثیر جهش های خاصی در گیرنده بر تمایل به اتصال به لیگاند را بررسی کنند. باوجود کاربرد روزافزون شبیه سازی دینامیک مولکولی در این زمینه، مسائل و مشکلات احتمالی نگران کننده ای شامل نمونه گیری زمانی ناکافی و تقریب های بکار رفته وجود دارد که می تواند نتایج ناسازگار با اطلاعات تجربی حاصل کند.

**استنتاج:** ابزارهای دینامیک مولکولی، باوجود هنوز چالش های کاربریشان، کمک غیرقابل انکاری در درک رفتار و ساختار پروتئین های غشایی فراهم کرده اند و با پیشرفت پیوسته سخت افزار، نرم افزار و الگوریتم ها، این ابزارها می توانند در آینده نقشی اساسی تر ایفا کنند.

**کلید واژه:** دینامیک مولکولی ، شبیه سازی ، پروتئین، غشا،

### مراجع

1. Bařtuř, T.; Kuyucak, S. *Biophysical Reviews* 2012, 4(3), 271-282.
2. Mori, T.; Miyashita, N.; Im, W.; Feig, M.; Sugita, Y. *Biochimica et Biophysica Acta (BBA) - Biomembranes* 2016, 1858(7), 1635-1651.
3. Grossfield, A. *Biochim Biophys Acta* 2011, 1808(7), 1868-1878.
4. Dror, R. O.; Dirks, R. M.; Grossman, J. P.; Xu, H.; Shaw, D. E. *Annu Rev Biophys* 2012, 41, 429-452.
5. Wang, Y.; Zhao, T.; Wei, D.; Strandberg, E.; Ulrich, A. S.; Ulmschneider, J. P. *Biochim Biophys Acta* 2014, 1838(9), 2280-2288.