

آنتروپی ساختاری در تغییرات ساختار پروتئین، آنالیز محاسباتی و ابزاری

محمد صادق ندیمی فر^{*}، علی اکبر موسوی موحدی

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

(این مقاله در مجموعه سمینارهای تحصیلات تکمیلی بیوفیزیک در نیمسال اول ۹۸-۹۹ ارائه گردید)

چکیده

آنتروپی کمیتی ترمودینامیکی است که اندازه‌ای برای درجه بی‌نظمی در هر سیستم است. در پروتئین‌ها نیز طی فرایندهای مختلف اعم از تاشدگی و واسرشتگی پروتئین، اندرکنش بین مولکولی و ... تغییراتی ساختاری ایجاد می‌شود که منجر به تغییر در میزان بی‌نظمی یا آنتروپی خواهد بود. آنتروپی ساختاری در ارتباط با تعداد ساختارها برای آن مولکول می‌باشد. به طور معمول آنتروپی ساختاری برای رشته اصلی و ریشه‌های جانبی پروتئین تعریف می‌شود.

یکی از روش‌های اندازه‌گیری آنتروپی ساختاری از طریق محاسبه حالات محتمل برای هر آمینواسید در زاوایای دی‌هدرال رشته اصلی یا روتامرهای ریشه جانبی می‌باشد. از این خصوصیات برای تعریف درجه آزادی استفاده می‌شود. این متغیرها با کمک معادله بولتزمن می‌تواند میزان آنتروپی ساختاری را بیان کند. از سوی دیگر تنها روش تجربی که قادر به اندازه‌گیری آنتروپی ساختاری است NMR relaxation می‌باشد.

میزان آنتروپی ساختاری مرتبط با یک ساختار مانند مارپیچ آلفا، ساختار تاشده یا واسرشته پروتئین وابسته به احتمال ایجاد آن است. آنتروپی ساختارهای پیچیده تصادفی و پروتئین‌های واسرشته بطور معنی‌داری از حالت تاشده بیشتر است. به نظر می‌رسد آنتروپی ساختاری ریشه جانبی نقش مهمی در تثبیت سطح انرژی در حالت واسرشته را بر عهده دارد و در نتیجه مانعی برابر تاخوردگی پروتئین است. هرچند که مطالعات جدید نشان داده که همین آنتروپی ریشه‌های جانبی قادر به تثبیت ساختار طبیعی پروتئین در برابر دیگر ساختارهای پیچیده است. در این مطالعه علاوه بر معرفی آنتروپی ساختاری و روش‌های اندازه‌گیری آن به نقش این پدیده در ساختار و پویایی پروتئین می‌پردازیم.

کلید واژه: آنتروپی ساختاری، زاویه دی‌هدرال، روتامر، معادله بولتزمن، NMR relaxation

مراجع

1. Zhang, Jinfeng, and Jun S. Liu. "On side-chain conformational entropy of proteins." *PLoS computational biology* 2.12 (2006): e168.
2. Doig, Andrew J., and Michael JE Sternberg. "Side-chain conformational entropy in protein folding." *Protein Science* 4.11 (1995): 2247-2251.
3. Creamer, Trevor P. "Side-chain conformational entropy in protein unfolded states." *Proteins: Structure, Function, and Bioinformatics* 40.3 (2000): 443-450.
4. Palazzesi, Ferruccio, Omar Valsson, and Michele Parrinello. "Conformational entropy as collective variable for proteins." *The journal of physical chemistry letters* 8.19 (2017): 4752-4756.
5. Brady, G. Patrick, and Kim A. Sharp. "Entropy in protein folding and in protein—protein interactions." *Current opinion in structural biology* 7.2 (1997): 215-221.