

Ministère de
l'Enseignement
Supérieur et de la
Recherche Scientifique

الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية
République Algérienne Démocratique et Populaire



المدرسة العليا للأساتذة - القبّة
Ecole Normale Supérieure de Kouba

وزارة التعليم
العالي
والبحث العلمي

قسم الفيزياء
BAC+5

الدراسة البيوفيزيائية لجزيئة البروتين (الأكوبورين 2F2B)

مذكرة التخرج

- لنيل شهادة أستاذ التعليم الثانوي في العلوم الفيزيائية -

من إعداد:

- ❖ قيطي أمينة
- ❖ غويلة أسماء
- ❖ مزمار فتيحة

لجنة المناقشة:

- ❖ الأستاذ المشرف: حاج موسى أحمد
- ❖ الأستاذ الممتحن: روبة يحي

دفعة

2014 - 2015

الفهرس

01.....	مقدمة.....
03.....	الفصل الأول: الجزء النظري.....
04.....	1-I) الميكانيك الجزيئي.....
04.....	2-I) حقل القوة.....
04.....	1-2-I) حقل القوة في المطيافية الإهتزازية.....
06.....	2-2-I) حقل القوة في الميكانيك الجزيئي.....
07.....	3-2-I) عبارة دوال الطاقة في حقل القوة في الميكانيك الجزيئي.....
08.....	أ- إستطالة الرابطة.....
08.....	ب- تشوهات الزوايا المكافئة.....
09.....	ج- طاقة الرابطة-زاوية التكافؤ.....
09.....	د- طاقة الإلتواء.....
09.....	هـ- تفاعلات بين الذرات غير المترابطة.....
10.....	و- الطاقة الإلكترونية.....
11.....	الفصل الثاني: التعرف على برنامج Arguslab.....
12.....	1-II) عمل برنامج Arguslab.....
12.....	1-1-II) عمل الفأرة في برنامج Arguslab.....

13.....	II-1-2) الشرح التدريجي للصورة العامة.
13.....	II-1-2-1) قائمة التعليمات العامة.
29.....	الفصل الثالث: دراسة جزيئة الأكوبرين 2F2B.
30.....	III-1) تحديد هندسة الأكوبرين 2F2B.
31.....	III-2) دراسة الأكوبرين 2F2B.
32.....	III-2-1) هندسة الأكوبرين 2F2B.
34.....	III-2-2) رموز الأحماض الأمينية.
35.....	III-2-3) إحصاء الأحماض الأمينية المشكلة لـ 2F2B.
36.....	III-3) الدراسة الطاقية للأكوبرين 2F2B.
36.....	III-3-1) حساب الطاقة لجزيئة 2F2B بواسطة Arguslab.
37.....	III-3-2) حساب الطاقة الكلية لمجموعة من الأحماض الأمنية للأكوبرين.
38.....	III-3-2-1) حساب الطاقة الكلية والإلكتروستاتيكية للأحماض الأمنية ARG.
39.....	III-3-2-2) مقارنة مختلف قيم الطاقات للجذر الأميني ARG.
45.....	III-4) عدد جزيئات الماء في القناة.
46.....	الخاتمة.
48.....	المراجع.

المقدمة

إنّ شرح وتفسير الخصائص الفيزيائية لجزيء ما، يقتضي معرفة بنيته الهندسية ومختلف مميزاته الطاقوية (طاقة الروابط، طاقة الإعاقة الفراغية، الطاقة الإلكترونية.....).

نجد عدّة طرق تجريبية تسمح بالحصول على البنية الهندسية والخصائص الطاقوية للجزيئات، حيث يعتبر حيود الأشعة x من أهم الطرق التجريبية لإيجاد بنية الجزيئات في الحالة الصلبة، أما الطريقة التي تعتمد على المطيافية ميكروموجة والطريقة التي تعتمد على الحيود الإلكتروني تسمحان بالحصول على بنية الجزيء في الحالة الغازية، كما أنّ مختلف تقنيات الكيمياء الحرارية تعمل على تحديد بعض المميزات الطاقوية كالأنتروبيا، والجدير بالذكر هنا أنّ هذه الطرق التجريبية على قدر أهميتها إلاّ أنّها تتطلب الكثير من الوسائل التجريبية والأجهزة واليد العاملة الخبيرة، مما يؤدي إلى خسارة مبالغ مالية كبيرة وزمن طويل، وفي وقت أين أصبح الإعلام الآلي يحل الكثير من المسائل المعقدة في مختلف المجالات وقد كان لمعرفة بنية المادة الحظ الوفير في ذلك حيث أصبح من السهل إستعمال برامج الحاسوب المخصصة لهذه الدراسة التي تعطي نتائج تُقارب النتائج التجريبية مع تقليل المصاريف وتقليص الوقت، ونجد أنّ هاته البرامج يمكنها إعطاء البنية الفراغية لأي جزيء نعرف صيغته الكيميائية، وتعتمد على نماذج نظرية أهمها:

نموذج الميكانيك الكمي ونموذج الميكانيك الجزيئي.

* نموذج الميكانيك الكمي (QM):

يهدف نموذج الميكانيك الكمي أساساً إلى تحديد الطاقة للجزيء وتوزيع الإلكترونات وتتضمن عدّة برامج تطبيقية مثل: MNDO, CNDO, AM1 ... وبرنامج أب إينيسيو "ab initio" الذي يمتاز بالدقة العالية عند تطبيقه على الجزيئات الصغيرة، وتعتبر الدراسة الكمية معقدة بحيث أنّها تبحث عن إحداثيات إلكترونات كل ذرة في الجزيء فكيف إذا كانت الدراسة لسلسلة من الجزيئات الكبيرة؟

* نموذج الميكانيك الجزيئي (MM):

يعتبر الميكانيك الجزيئي حالياً التقنية الأكثر إستعمالاً لإيجاد هندسة الجزيء في الفضاء وكذلك الخصائص الطاقوية كالطاقة الفراغية وحرارة التكوين، في هذه التقنية تهمل دراسة الإلكترونات للتسهيل، وتعتبر ذرات الجزيء المدروس ككتل صلبة وروابطها كنوابض.

هناك العديد من برامج (MM) لحساب الجزيئات المتوفرة حيث أنّ برنامجي MM2, PMM2 للباحث Alligner لهما أفضلية الإستعمال في الحسابات الخاصة بالجزيئات العضوية متوسطة الحجم، ونذكر منها: BLEMO, GENMOL, TINKER, ARGUSLAB, VMD وقد إختارنا في مذكرتنا برنامج "أرغيسلاب Arguslab" لسهولة إستعماله في دراسة البنية الهندسية الفراغية للجزيئات.

الهدف من مذكرتنا هو إيجاد البنية الفراغية لجزيئة الأكوبرين 2F2B بإستعمال برنامج Arguslab فذكرنا في المقدمة أنّ هناك طرق تجريبية ونظرية لإيجاد البنية الهندسية للجزيء.

في الفصل الأول شرحنا كيفية حساب حقل القوة للميكانيك الجزيئي.

في الفصل الثاني تطرقنا إلى شرح طريقة إستعمال برنامج Arguslab مع شرح أهم التعليمات التي تتحكم فيه.

وفي الفصل الثالث قمنا بتطبيق البرنامج على جزيئة الأكوبرين 2F2B بحيث شرحنا كيفية الحصول على البنية الهندسية وإيجاد مختلف الروابط، الزوايا، مواقع الذرات في الفضاء.