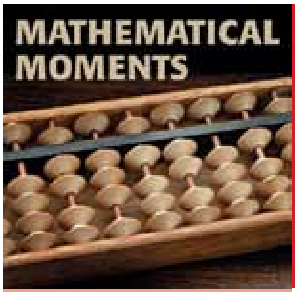
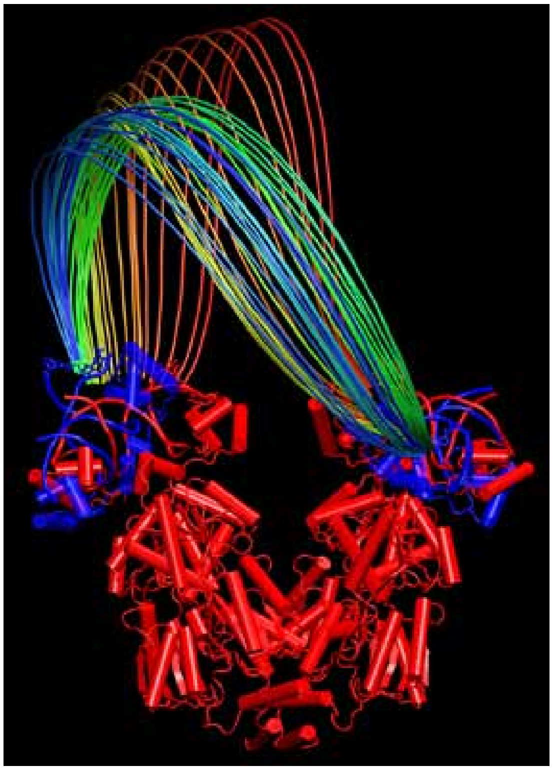


Biết Cách Gấp Của Protein

Xác định chuỗi gen con người là một thành tựu đáng kể, nhưng việc tiếp theo mới khó: Hiểu cấu trúc và chức năng của protein. Khoảng 100.000 protein trong cơ thể chúng ta khởi đầu, điều khiển hoặc thực hiện mọi chức năng sinh học của chúng ta thông qua các hình dạng (gọi là gấp) và liên lạc với các protein khác. Protein bị gấp sai hoặc sai đích có thể gây ra các bệnh như ung thư, bệnh đường hô hấp. Các nhà sinh học tính toán đang sử dụng hình học, xác suất và lý thuyết nút để mô tả quá trình gấp phức tạp của protein. Khi biết được chính xác cách mà một protein bị lỗi, các loại thuốc có thể được thiết kế để giải quyết vấn đề đó, khôi phục lại các tế bào bị ảnh hưởng.

Protein tụ hợp và tái tụ hợp trong không gian vô cùng nhỏ. Mô phỏng chức năng của chúng là rất phi thường, bao gồm hàng triệu phép tính tại mỗi khoảng thời gian nhỏ. Hầu hết các chuyên ngành trong toán học—bao gồm lý thuyết tích phân, phương trình đạo hàm riêng, đại số tuyến tính và giải tích số—được sử dụng để mô phỏng hành vi protein, mà ngay cả đối với những protein đơn giản nhất, cũng yêu cầu tính toán song song để giải quyết. Có vẻ như tập trung nỗ lực lớn như vậy vào một khu vực nhỏ xíu như vậy là khác thường, nhưng đây là việc làm hiệu quả: Một số dòng HIV đã kháng thuốc, nhưng mô hình của một protein HIV, enzyme *integrase*, đã được phát hiện có một khe nhỏ kích cỡ nano có thể được lấp đầy bằng một hợp chất giúp chống lại việc virus kháng thuốc.


Ảnh của Nhóm Vật lý sinh học Lý thuyết và Tính toán, Đại học Illinois.

Tài liệu tham khảo: *From Protein Structure to Function with Bioinformatics* (Đi từ Cấu trúc đến Chức năng của Protein thông qua Tin sinh học), Daniel John Rigden.

AMS
American Mathematical Society

*Chương trình **Mathematical Moments** thúc đẩy sự tiếp nhận và thấu hiểu vai trò của toán học trong khoa học, tự nhiên, công nghệ, và văn hóa nhân loại.*

www.ams.org/mathmoments

MM/79/VN