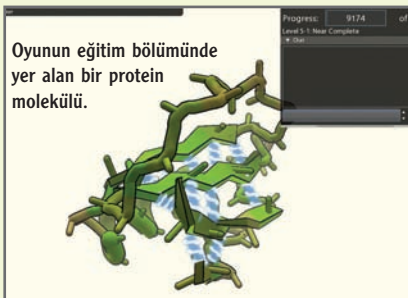


PROTEİN KATLAMA OLİMPİYATLARI

'Bilgisayar oyunlarında benden iyisi yoktur' diyorsanız, Nobel ödülü almak için bir şansınız var! Washington Üniversitesi, yapısal biyolojiye katkıda bulunmak isteyen oyuncuları bekliyor. Üstelik bu oyun ücretsiz ve biyolog olmanızı da gerektirmiyor. Çoklu ortamda çalışan oyun, protein moleküllerinin yapısını oluşturma işini çekişmeli bir spora dönüştürüyor.

Proteinler amino asitlerden oluşan dev moleküllerdir ve insan bedeninde 100.000'den çok protein çeşidi var. Bedenimizi oluşturan trilyonlarca hücrenin hepsi de işlerini proteinlerle görür. Amino asitlerse karbon, oksijen, azot, kükürt ve hidrojenle oluşan küçük moleküllerdir. Amino asitler birbirlerine bağlanarak düz, dev protein zincirleri oluşturur. Ancak proteinler uzun, açık bir zincir şeklinde duramaz. Kendiliklerinden ya da başka moleküllerin yardımıyla katlanarak üç boyutlu, sıkışık bir yapı oluştururlar. Kendiliğinden oluşan bu yapı proteinin en kararlı halidir ve onun görevini belirler. Proteinin şeklini bulmak, gerçekte onun nasıl çalıştığını, ne işe yaradığını ve onun nasıl kontrol edilebileceğini bulmak demektir. Günümüzde birçok proteinin amino asit dizilimi biliniyor ancak katlanmış yapısı hâlâ bilinmiyor. Alzheimer, AIDS, sıtma gibi hastalıkların tedavisi de bu yapıların çözümlenmesinden geçiyor.

AIDS'e yol açan HIV virüsünün yapısının büyük bir bölümünü proteinler oluşturuyor. Virüs insan hücrelerine girdiğinde kendini çoğaltmaya yarayacak başka proteinler oluşturuyor. Kendini çoğaltmak için kullandığı proteinlerin yapısını çözümlenerek bu proteinlerin işlevini durduran ilaçlar üretilebilir.



Oyunun açılış sayfasında araştırmacıların isimleri yer alıyor

AIDS'ten (bedenimize dışarıdan giren proteinlerden) farklı olarak, kanserde kendi hücrelerimizdeki proteinler suçludur. Hastalık, bir grup hücrenin kontrolsüz büyümesiyle ortaya çıkar. Bedenimizde hücrelerin çoğalmasını kontrol eden sistemler vardır. Ama UV ışınları ya da sigarayla bedenimize giren kimyasal maddeler gibi bazı etkenler bu sistemlere zarar verebilir. Bedenimizdeki tümör baskılayıcı protein53 (p53) gibi bazı proteinlerin hasarı tanıma ve hücreleri kansere dönüşmeden durdurma yetisi vardır. Ne var ki hasar ileri düzeye ulaştığında bu sistemler de işe yaramaz.

Peki, neden bu işi çağımızın sihirli değneği bilgisayarlarımıza bırakmıyoruz? Cevaplayalım: En küçük proteinin bile yapısını oluştururken değerlendirilmesi gereken sayı astronomiktir. Foldit'in yaratıcıları bu işi yalnızca bilgisayarlarla yürütmeyi daha önce denemiş. 2005 yılında "Rosetta@home" adlı projede, gönüllülerin bilgisayarlarından oluşan büyük bir ağ kullanılarak protein moleküllerinin en kararlı halleri oluşturulmaya çalışılmış. Bu proje için '200.000 gönüllü bile yeterli değildi' diyor Prof. Dr. David Baker ve ekliyor 'Bilgisayar simülasyonları proteinlerin olabilecek bütün şekillerini hesaplayabilir ama bu matematiksel problem o kadar büyük ki dünyadaki bilgisayarların hepsini birleştirseniz bile çözülmesi yüzyıllar alabilir. Küçük moleküller konusunda simülasyonlar başarılı olsa da molekül büyüdük-

çe zorlanmaya ve başarısız olmaya başlıyorlar'.

Foldit, "Rosetta@home"nin protein katlama yazılımını taşıyor; ama her şeyi de yazılıma bırakmıyor. Problemin çözümünde insanların üç boyutlu problem çözme becerisine güveniyor. Bilgisayarımıza kalsa birkaç yüz bin denemede bulanacak bir katlama şeklini sizin bulmanız 2 dakikadan kısa sürebilir. Yazılım temel konularda yardım ediyor: Yaptığınız işlemleri aklında tutmak, molekül katlarken optimizasyona gerek duyduğunuzda yardım etmek, çok merak ederseniz oluşturulan moleküle ilişkin ayrıntılı bilgi vermek gibi işlevleri de var. Foldit oyununa tek başınıza katılabileceğiniz gibi bir grup oluşturup da katılabiliyorsunuz. Oyunda her molekül için en iyi katlama puanını görebiliyor, öteki oyuncularla konuşabiliyor, düşünce alışverişinde bulunabiliyorsunuz. Foldit'in hem gerçeği yansıtan hem de eğlenceli bir oyun olabilmesi için Washington Üniversitesi'nden lisans öğrencileri, doktora öğrencileri, öğretim görevlileri ve araştırmacılar bir yıldan çok çalışmış. Sonuçta ortaya çıkan şey herhangi bir video oyununu aratmıyor.

Mayıs ayının ortasında dağıtılmaya başlayan oyun, şimdilik yapısını zaten çok iyi bildiğimiz molekülleri, oyunculara veriyor. Araştırmacılar, oyuncuları bunun yanında bir başka yarışmaya da katılmaya çağırıyor: Sekizincisi düzenlenen Protein Yapılarının Tahmininde Kritik Tekniklerin Değerlendirilmesi (Critical Assessment of Techniques for Protein Structure Prediction -CASP) adlı, uluslararası protein katlama yarışması. Bu yarışmanın birincileri genellikle karmaşık yazılımları bu iş için tasarlanmış bilgisayar yığınlarında çalıştırarak sonuca ulaşıyorlar. Foldit ise gönüllülerine 'Hiçbir bilgisayar yazılımı 20.000 insanın ortak yaratıcılığına eşdeğer değildir!' sloganıyla CASP'ın ısınma egzersizlerini çözdürüyor.

Özden Hanoğlu

<http://fold.it>, <http://www.sciencedaily.com/releases/2008/05/080508122520.htm>