

CORRELACIONS ENTRE HIDROFOBICITAT I HELICITAT EN PROTEÏNES

per PERE PUIGDOMÈNECH i JAUME PALAU

Institut de Biologia Fonamental, Universitat Autònoma
de Barcelona

Hom ha establert correlacions entre l'ordenament dels aminoàcids en general, i en particular dels hidrofòbics, i l'helicitat α de determinades regions d'una proteïna. El material d'estudi ha estat el conjunt de dotze proteïnes, de les quals són conegudes les estructures primària, secundària i terciària. El nombre total d'aminoàcids analitzats és de 2.259, dels quals 790 són trobats en zones d'hèlix α .

La primera part dels resultats consisteix en un estudi de la distribució de cada aminoàcid en zones d'hèlix α i en les altres. Observem una composició diferent per a les dues zones, amb més gran abundància de Pro i Gly en zones de no-hèlix i un augment d'Ala, Leu, Gly i His en les zones d'hèlix.

A continuació ha estat estudiada la distribució dels aminoàcids hidrofòbics en els sis possibles triplets que hi poden haver en un torn d'hèlix (1-2-3, 1-2-4, 1-2-5, 1-3-4, 1-3-5, 1-4-5), tant en zones d'hèlix α com en les de no-hèlix α . La comparació del nombre d'aquests triplets-normalitzat respecte a la longitud de les zones corresponents, amb la probabilitat teòrica calculada pels triplets, indiquen un predomini suficientment clar de triplets hidrofòbics dels tipus 1-2-5 i 1-4-5 en les zones d'hèlix α .

També ha estat estudiada la concentració dels triplets en certes zones de les hèlix α . Efectivament, hi ha molts triplets 1-2-5 i 1-4-5 formant encadenaments que resulten en la formació de zones predominantment hidrofòbiques. Aquest fet ha permès la classificació de les hèlix α en tres tipus de zones: zones d'hidrofobicitat concentrada, zones pobres en aminoàcids hidrofòbics i els doblats inicial i final dels trossos d'hèlix α . La composició en aminoàcids de cada una d'aquestes zones ha estat establerta.

El conjunt d'aquests resultats permet de posar de manifest la contribució de les interaccions hidrofòbiques d'un torn a un altre de l'hèlix α en la formació i el manteniment de l'estructura secundària de les proteïnes.

Per calcular la significació de les diferents distribucions d'aminoàcids, ha estat portat a terme un test de χ^2 , el qual ha demostrat que els resultats de la distribució d'aminoàcids en zones d'hèlix α i, dintre aquestes, en les zones d'hidrofobicitat concentrada són significatius amb una seguretat del 99,9 % i en les zones terminals amb un 99 % de seguretat.

També ha estat portat a terme un altre tipus d'anàlisi. Hom tracta de calcular la significació dels resultats obtinguts amb els triplets 1-2-5 i 1-4-5 respecte a la mostra investigada. Dos tests estadístics ens demostren els límits de la significació. D'una banda, ha estat calculada l'evolució de la mitjana i de la desviació *standard* ponderada en prendre totes les combinacions possibles de les 12 proteïnes que formen la mostra en grups cada cop més petits des d'onze fins a un. La mitjana és mantinguda amb molt petites variacions i la desviació *standard* mostra un màxim vers les quatre-cinc combinacions. És mantinguda en valors molt baixos fins a 9 combinacions, límit de la significació de la mostra. D'altra banda, han estat preses vuit proteïnes a l'atzar i ha estat calculada la correlació de les sèries de mitjanes que apareixen en substituir una proteïna de les vuit per cadascuna de les altres quatre. Els coeficients de correlació en tots els casos són sempre acceptables, per sobre de 0,9 en gairebé tots els casos. La mostra presa és, doncs, significativa.