

Estudo de Nós (*knots*) em Proteínas com topologia 3₁.

Paula Martins da Silva¹ (PG)*, Julio Ricardo Sambrano² (PQ), Aguinaldo Robinson de Souza² (PQ)

¹ UNIP – Universidade Paulista, Departamento ICET, ² UNESP - Univ Estadual Paulista, POSMAT – Programa de Pós-Graduação em Ciência e Tecnologia de Materiais, Laboratório de Simulação Molecular
*educapaula@fc.unesp.br

Palavras Chave: Nós em Proteínas, Topologia das Proteínas, Teoria dos Nós, Tabulando Nós.

Introdução

Um dos grandes desafios da Ciência é entender o mecanismo pelo qual uma proteína obtém e mantém a sua estrutura nativa tridimensional. Nas últimas décadas, extensivo trabalho experimental e teórico tem sido realizado com foco em sistemas possuindo estruturas secundárias bem conhecidas como alfa hélices e folhas betas. Após o descobrimento da primeira estrutura protéica apresentando um nó (*knot*), o estudo de enovelamento protéico foi alçado a outros níveis de análise devido, em grande parte, á necessária revisão de alguns modelos tidos como paradigmas na área como o conceito de “ordem de contato”. Até o momento cerca de 1% de estruturas foram identificadas no (Protein Data Bank) PDB¹, que corresponde aproximadamente a 300 proteínas. A maioria das estruturas apresenta topologia 3₁ (trevo), 4₁ (desenho-oito) e 5₂. Estas topologias são apresentadas na Figura 1.

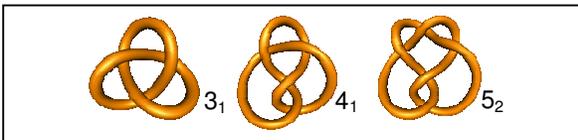


Figura 1. Topologias associadas aos nós.

A Teoria dos Nós, é utilizada atualmente no estudo de alguns fenômenos na Física como, por exemplo, na Teoria de supercordas, na Bioquímica na compreensão e propriedades do DNA e RNA, e na química de polímeros. Do ponto de vista matemático um nó é definido como uma inclusão continua de uma circunferência no espaço tridimensional em curvas fechadas e sem auto-interseções. Neste trabalho apresentamos a determinação do polinômio de Alexander² para estruturas com nós na topologia 3₁.

Resultados e Discussão

No calculo do polinômio de Alexander utilizamos o valor do determinante da matriz associada ao diagrama de enlace (D) composto pelos cruzamentos e arcos. Para identificar os cruzamentos utilizamos números naturais e os arcos foram representados por letras (Figura 2).

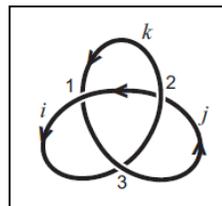


Figura 2. Diagrama (D) do nó 3₁ (trevo)

Existem dois sentidos para a direção orientada dos arcos: o cruzamento terá valor positivo quando o arco passar por cima, e negativo no caso contrario. A partir da Matriz $M_{n \times n}$ calculamos o determinante removendo a última linha e a última coluna. O determinante é o polinômio de Alexander do nó representado por $\Delta D_k(t)$.

$$M \begin{pmatrix} D & 1 \\ t \end{pmatrix} = \begin{matrix} & i & j & k \\ \begin{matrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{matrix} & \begin{bmatrix} 1-t & t & -1 \\ t & -1 & 1-t \\ -1 & 1-t & t \end{bmatrix} \end{matrix}$$

$$M \begin{pmatrix} D & 1 \\ t \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} 1-t & t \\ t & -1 \end{bmatrix}$$

$$\Delta D_k(t) = M \begin{pmatrix} D & 1 \\ t \end{pmatrix} = -t^2 + t - 1$$

Conclusões

O polinômio de Alexander para o nó 3₁ obtida neste trabalho ($-t^2 + t - 1$) pode ser utilizada, inicialmente, na classificação das proteínas que possuem esta topologia. Em trabalhos futuros serão envidados estudos na busca de uma correlação entre a topologia dos nós e o processo de enovelamento e estabilidade de proteínas.

Agradecimentos

CNPq, FAPESP e FUNDUNESP.

¹ <http://www.rcsb.org/pdb/home/home.do>, acessado em Janeiro de 2010

² Adams C. C., The Knot Book: An Elementary Introduction to the Mathematical Theory of Knots, American Mathematical Society, 2004.