

Soluzione preliminare del problema 28

Problema 28) Un peptide fossile

Domanda A) Determinare la sequenza del polipeptide fossile di 19 amminoacidi.

Sono fornite le masse di ioni (ottenuti da spettrometria MS-MS) che partono dall'amminoacido N-terminale e hanno subito frammentazione prima del carbonile dell'amminoacido numero n (ioni an) oppure dopo il carbonile dell'amminoacido numero n (ioni bn).

Inoltre sono fornite masse di ioni che partono dall'amminoacido C-terminale e hanno subito frammentazione dopo il gruppo amminico dell'amminoacido in posizione n (ioni yn).

Per ottenere la massa del frammento di amminoacido in posizione n, si deve calcolare la differenza di massa tra lo ione n e quello n-1. La massa dell'amminoacido si ottiene aggiungendo 18 (H + OH) a questo valore. Per l'amminoacido numero 1: va aggiunto 45 (COOH) per lo ione a1; va aggiunto 17 (OH) per lo ione b1; va tolto 1 (H) per lo ione y1.

Si ottiene:

AA1	(y19)	(data dal problema)		Tyr
AA2	(y18)	(data dal problema)		Leu
AA3	(y17)	$y_{17} - y_{16} = 115,0$	$155,0 + 18 = 133,0$	Asp
AA4	(y16)	$y_{16} - y_{15} = 137,0$	$137,0 + 18 = 155,0$	His
AA5	(y15)	$a_5 - a_4 = 186,1$	$186,1 + 18 = 204,1$	Trp
AA6	(y14)	$a_6 - a_5 = 113,1$	$113,1 + 18 = 131,1$	Ile, Leu, Hyp
AA7	(y13)	$b_7 - b_6 = 57,0$	$57,0 + 18 = 75,0$	Gly
AA8	(y12)	$b_8 - b_7 = 71,1$	$71,1 + 18 = 89,1$	Ala
AA9	(y11)	$b_9 - b_8 = 113,0$	$113,0 + 18 = 131,0$	Ile, Leu, Hyp
AA10	(y10)	$b_{10} - b_9 = 71$	$71,0 + 18 = 89,0$	Ala
AA11	(y9)	$(a_{11} + 28) - b_{10} = 97,1$	$97,1 + 18 = 115,1$	Pro
AA12	(y8)	$b_{12} - (a_{11} + 28) = 163,1$	$163,1 + 18 = 181,1$	Tyr
AA13	(y7)	$y_7 - y_6 = 97$	$97,0 + 18 = 115,0$	Pro
AA14	(y6)	$y_6 - y_5 = 115$	$115,0 + 18 = 133,0$	Asp
AA15	(y5)	$(a_{15} + 28) - b_{14} = 97,1$	$97,1 + 18 = 115,1$	Pro
AA16	(y4)	$b_{17} - b_{15} = 242,1$	$242,1 + 36 = 278,1 - 147(\text{Glu}) = 131,1$	Ile, Leu, Hyp
AA17	(y3)	$y_3 - y_2 = 129,0$	$129,0 + 18 = 147,0$	Glu
AA18	(y2)	$y_2 - y_1 = 97,1$	$97,1 + 18 = 115,1$	Pro
AA19	(y1)	$y_1 = 175,1$	$175,1 - 1 = 174,1$	Arg

Il peptide fossile ha dunque la sequenza di amminoacidi mostrata sopra, dove l'AA N-terminale è Tyr, mentre quello C-terminale è Arg. Gli amminoacidi Ile, Leu e Hyp sono indistinguibili, perchè hanno massa identica. Dove è scritto Ile* potrebbe esserci Ile, Leu o Hyp.

$\text{NH}_2\text{-Tyr-Leu-Asp-His-Trp-Ile*}-\text{Gly-Ala-Ile*}-\text{Ala-Pro-Tyr-Pro-Asp-Pro-Ile*}-\text{Glu-Pro-Arg-COOH}$

Domanda B) Individuare la proteina moderna a cui quella fossile può essere correlata.

La sequenza del peptide fossile può essere scritta in forma più compatta con i codici ad una lettera:

YLDHWI*GAI*APYPDPI*EPR

Considerando che I, L e P sono indistinguibili, questa sequenza è identica alla proteina di cavallo:

YLDHWLGPAPYPDPLEPR

Soluzione proposta in via preliminare da
prof. Mauro Tonellato
ITIS Natta di Padova

e da Luca Zucchini
medaglia di bronzo alle olimpiadi IChO 2008