

Пептидное какуро (Химия, старшие классы, автор - Гарифуллин Б.Н.)

В связи с декодированием вражеской стороной предыдущих сообщений агент, осуществляющий шпионаж в нанобиологическо-исследовательском федеральном инновационном городе-агломерации (НИФИГА), отправил послание с аминокислотной последовательностью крайне значимого олигопептида **N** в виде приведенной ниже шифровки (прямоугольник 10x12):

	8	9	15	12				23	8
10			D		10		10/16		
35		I				3/11			
	4			6/12		F			
		8/4			21/3			6	3
	4/11	V				7/8			
4			13/12				15/3		
7				10/14	G				
		24/4			15/6			11	
	17/27				E	13/3			8
24	P			16				A	
16					29		L		

Центру известно, что определение искомого пептида требует полного заполнения пустых белых клеток шифровки цифрами от 1 до 9. Белые клетки объединяются в группы, как по горизонтали, так и по вертикали. Цифры, заполняющие группу, в сумме дают ключевое число, расположенное в серой клетке. Для дробей, приведенных в серых клетках, числитель отражает сумму цифр для группы клеток по вертикали, знаменатель – по горизонтали. Слагаемые ключевого числа не должны повторяться.

Заглавные латинские буквы обозначают общепринятые однобуквенные сокращения протеиногенных аминокислот (A, D, E, F, G, I, L, P, и V): каждой аминокислоте строго соответствует одна цифра. В одной из вертикальных или горизонтальных групп клеток и будет содержаться структура нужного Центру пептида.

1. Заполните представленную шифровку цифрами согласно правилам, озвученным в условии, и установите соответствия однобуквенных сокращений аминокислот и цифр (1-9).
2. Какие ограничения на структуру передаваемых в Центр пептидов накладывает подобный метод шифрования?
3. Информация о каком максимальном количестве олигопептидов может быть передана с помощью данного способа в рамках одного прямоугольника 10x12? Хватит ли разнообразия протеиногенных аминокислот, чтобы структуры олигопептидов в такой шифровке не дублировались?

Из других источников Центр знает о том, что обработка искомого олигопептида химотрипсином [гидролизует пептидные связи, образованные карбоксильными группами фенилаланина (F) или лейцина (L)] приводит к образованию, помимо свободных аминокислот, двух дипептидов.

4. Определите аминокислотную последовательность зашифрованного пептида.

Максимальная оценка – 10 баллов

Решение (10 баллов)

1. Решение данной головоломки:

	8	9	15	12				23	8
10	1	2	4(D)	3	10		10/16	9	7
35	7	6(I)	5	9	8	3/11	2	8	1
	4	1	3	6/12	2	1(F)	3	6	
		8/4	1	3	21/3	2	1	6	3
	4/11	3(V)	2	1	5	7/8	4	3	1
4	3	1	13/12	2	9	1	15/3	1	2
7	1	4	2	10/14	7(G)	4	1	2	
		24/4	1	3	15/6	2	4	11	
	17/27	8	3	7	9(E)	13/3	2	1	8
24	8(P)	9	7	16	6	4	3	2(A)	1
16	9	7			29	9	5(L)	8	7

(4 балла)

2. Данным способом можно шифровать только:

- 1) олигопептиды, содержащие от двух до девяти аминокислотных остатков;
- 2) все аминокислотные остатки, образующие пептид, должны различаться (другими словами, не возможен дубляж какой-либо аминокислоты).

(по 0,5 балла, всего 1 балл)

3. Максимальное число пептидов размещается в матрице 9 на 11 клеток в случае, если большинство из них будут дипептидами. Наиболее выгодное шахматное расположение серых клеток формируется с применением логического метода:

Наличие пустых клеток на верхней горизонтали и левой вертикали противоречит идеологии какуро, так как не задается сумма цифр в соответствующей группе клеток. Всего в представленном выше квадрате можно разместить 59 групп клеток, однако мы не знаем направление прочтения (например, справа-налево или наоборот), поэтому всего прямоугольник в пределе будет содержать информацию о 118 олигопептидах.

Из этих 118 олигопептидов большинство содержит по два аминокислотных остатка. Однако, общее число дипептидов, которое можно образовать при помощи 22-х протеиногенных аминокислот, если каждая аминокислота используется только один раз составляет:

$$N = 22 \cdot 21 = 462,$$

что значительно превышает число дипептидов в рассмотренной "идеальной" матрице.

(3 балла, из которых 1 балл – за расчет числа дипептидов)

4. В составе искомого пептида есть аминокислотные остатки или фенилаланина, или лейцина, или оба одновременно. Сопоставление возможных вариантов с полностью разгаданной головоломкой приводит к выявлению двух искомых пептидов, располагающихся в третьей слева вертикали (в зависимости от направления прочитывания):

D-L-V-F-A (1) и A-F-V-L-D (2)

Тетрапептид E-L-P-G, находящийся на нижней горизонтали, не подходит в виду того, что при ее ферментативном гидролизе не образуется свободных аминокислот.

(по 1 баллу за каждый пентапептид, всего 2 балла)