Pequena Crónica Arqueológica *

Pierre Laszlo ^a

A estrutura do icosaedro

Os sólidos de Platão foram notícia com a distinção atribuída ao Dr. Aaron Klug, do Laboratório de Biologia Molecular do Conselho de Investigação Médica, em Cambridge, Inglaterra, do prémio Nobel da Química em 1982. Klug, um colaborador de Rosalind Franklin que assumiu a liderança do grupo após a sua morte prematura, em 1958, foi homenageado, se posso resumir sucintamente os seus estudos, por inventar métodos cristalográficos especiais para processamento de dados de difracção óptica de micrografias de electrão de modo a «observar» a ordenação bidimensional que consitui o revestimento proteico dos vírus; pelo conceito de quasi-equivalência e por enumerar todas as formas possíveis para partículas isométricas tais como vírus; por elucidar em pormenor a estrutura do vírus mosaico do tabaco, na qual se empilham, em hélice, discos constituídos por 2 camadas de 17 subunidades proteicas cada, com a cadeia de RNA enrolada entre as espiras daquela hélice. Estes são os resultados fundamentais.

O que aqui pretendo, de modo a ligar o seu trabalho à química estrutural contemporânea e também mostrar a introdução das suas ideias na bioquímica e na química, é sublinhar um único tópico, o da estrutura proteica nos tão falados vírus icosaédricos.

Em primeiro lugar, o que é um icosaedro? O leitor lembrar-se-á dos 5 sólidos de Platão: o tetraedro, o octaedro, o cubo, o dodecaedro e o icosaedro. Estes são os únicos poliedros regulares inscritíveis numa esfera, e construídos a partir de polígonos idênticos. O icosaedro (do grego *icosa* = vinte) tem $F=20$ faces na forma de triângulos equiláteros. $C=12$ vértices e, consequentemente (da fórmula de Euler (1752) $E=F+C-2$), $E=30$ arestas.

Existem estruturas inorgânicas formadas por, ou baseadas em, icosaedros. Pequenas aglomerações de átomos de ouro encontradas em microcristais, designadas *cristalóides* por Mackay [1], possuem formas icosaédricas de 13, 55, 147, 309 e 561 átomos que são estáveis em relação ao arranjo competitivo cúbico de faces centradas [2]. Muitas estruturas de ligas metálicas envolvem também icosaedros e seus derivados.

Tal como o dodecaedro, o icosaedro não aparece apenas no domínio inorgânico. A Biologia também se serve do icosaedro. Os vírus são um caso particularmente importante. A ideia original sobre a construção estrutural dos vírus deve-se a Crick e Watson, em 1956 [3]. Neste artigo da «Nature», eles sugeriram que vírus de configuração em haste são consti-

tuídos por arranjos helicoidais, e os vírus esféricos por arranjos cúbicos de subunidades de proteína. Uma vantagem biológica de usar subunidades idênticas é que, consequentemente, uma quantidade mínima de informação tem de estar codificada no ácido nucleico virulento [3].

Debrucemo-nos sobre os vírus esféricos. Há três tipos de simetria cúbica: tetraédrica (grupo pontual 2:3), octaédrica (4:3:2), e icosaédrica (5:3:2), correspondendo aos números máximos de 12, 24, e 60 subunidades idênticas.

Foi este o ponto de viragem para a teoria dos vírus, entendidos como partículas isométricas com formas poliédricas uma vez que já era conhecido, nos fins dos anos 50 e 60, que muitos vírus eram constituídos por várias centenas de subunidades de proteína. Parecia haver aqui uma contradição lógica ou um paradoxo.

A solução veio de um artigo original do nosso laureado, A. Klug, em colaboração com D.L.D. Caspar, em 1962 [4]: eles mostraram, não só, que a simetria icosaédrica é vantajosa em relação às simetrias cúbicas alternativas (60, em vez de simplesmente 12 ou 24 subunidades), mas também, resultado de longe mais importante, que não existe limite para o número de subunidades que pode ser arranjado numa rede icosaédrica, uma vez que o requisito da equivalência pontual é abandonado em favor do requisito menos restritivo da *quasi-equivalência*.

O que é a *quasi-equivalência*? Simplesmente o reconhecimento de que, na formação de uma camada poliédrica estável as subunidades de proteína tenderão a formar, umas com as outras, tantas ligações quantas as possíveis, e que «as subunidades não necessitam de estar em locais *exactamente* equivalentes para que a energia do sistema seja mínima» [5]. E o maior grau de quasi-equivalência está associado ao icosaedro [4]. Caspar e Klug [4] procederam, então, à enumeração de todas as redes icosaédricas possíveis, redescobrimo uma enumeração de Goldberg [6], antiga e desconhecida, que permanecia como uma curiosidade matemática desde 1937! Mostraram que camadas fechadas com subunidades quasi-equivalentes, simétricas, podem ser construídas com 60 T subunidades, onde T, o tão falado número de triangulação, é dado pela relação $T=Pf^2$, onde f é qualquer inteiro, e P pertence à sequência 1, 3, 7, 13, 19, 21, 31, 37... ($h^2 + hk + k^2$, para todos os pares de inteiros h e k sem nenhum factor comum).

* Traduzido por Filomena Freitas, com o acordo do Prof. Pierre Laszlo, de «Petite Chronique Archéologique», Nouv. J. Chim., 7, 145 (1983).

^a Laboratoire de Chimie, École Polytechnique, 91128 Palaiseau Cedex, França.

Além disso, numa rede de superfície simples, constituída por 420 subunidades, por exemplo, a aglomeração de subunidades pode produzir uma variedade de aspectos «isoméricos»: agrupamentos em dímeros conduzem a 210 unidades morfológicas, agrupamentos em trímeros produzem 140 dessas unidades, etc. Para ilustrar isto com exemplos concretos, pode dizer-se que o agrupamento de dímeros na superfície do vírus do tomate (*tomato bushy stunt virus*) produz 90 unidades morfológicas ($T=3$), enquanto que agrupamentos hexâmeros – pentâmeros na superfície dos vírus *Polyoma* e *papilloma* ($T=7$) produzem 72 unidades morfológicas [5]. O trabalho de Klug e seus colaboradores foi tão importante que alterou a sistematização dos vírus. Daí em diante, os vírus icosaédricos surgiram como uma classe independente e importante (Tabela I).

TABELA I
Alguns dos vírus icosaédricos

<i>Brome mosaic virus</i>	<i>Polyoma virus</i>
<i>Cowpea chlorotic mottle virus</i>	<i>Single-stranded RNA phages</i>
<i>Cucumber papilloma virus</i>	<i>Southern bean mosaic virus</i>
<i>Papovaviruses</i>	<i>Tomato bushy stunt virus</i>
<i>Polio virus</i>	<i>Turnip yellow mosaic virus</i>

As formas de todos estes vírus icosaédricos são determinadas apenas pelas propriedades das subunidades de proteína, especialmente pelas (presumíveis) interações hidrofóbicas entre aqueles. Esta afirmação pode ser reescrita recorrendo a Francis Crick [3]: «uma Natureza eficiente esboçaria as

partes de um vírus (ou de outro modelo macromolecular regular) de tal modo que, dado um modelo apropriado das partes a uma criança, ela as pudesse juntar *de um único modo*. As cúpulas geodésicas de R. Buckminster Fuller podem relacionar-se com a impossibilidade de construir uma estrutura fechada sem hexágonos. Consequentemente, a sua superfície é construída a partir de triângulos quasi-equivalentes, no sentido acima definido [4], de modo que, por exemplo, uma esfera completa é composta de 720 unidades e os triângulos pertencem a 12 tipos (ligeiramente) diferentes. Na sua conceptualização do modelo virulento, Caspar e Klug basearam-se na técnica do engenheiro de génio, R. Buckminster Fuller, e os seus artigos, começando com a discussão de 1962 [4], reconhecem explicitamente a sua dívida para com as ideias e a ajuda de Fuller.

Na verdade, sempre que se associam elementos por interações de curto-alcance em oposição às de longo-alcance, sejam eles nucleões no núcleo atómico, átomos nas moléculas ou moléculas nos modelos supramoleculares, tais como os clatratos dos gases raros ou dos vírus, podem e formam-se poliedros. E entre estes, os sólidos de Platão continuam a ser os eternos favoritos; o icosaedro continua a ser a escolha predominante, pela razão acima apresentada, quando as subunidades de proteína se reúnem para formar um revestimento virulento.

Para terminar, não resisto em chamar a atenção para uma esquecida e algo patética figura, a da cristalógrafa, bioquímica e matemática Dorothy M. Wrinch (1895-1976). Ela propôs nos anos 30 a chamada «teoria cyclol» da estrutura das proteínas para explicar o carácter ordenado das moléculas de proteína o qual, nessa época, começava a ser detectado a partir dos primeiros dados de raios X de proteínas, obtidos por J.D. Bernal e Dorothy Crowfoot Hodgkin. A sua teoria foi inicialmente uma adversária viável à de Linus Pauling: a teoria de Wrinch baseava-se no arranjo de aminoácidos em peptídeos cíclicos, enquanto a de Pauling se baseava nas ligações de hidrogénio, conduzindo a hélices α e lâminas β . A teoria de Pauling mostrou-se, evidentemente, ser aceitável e a de Wrinch caiu rapidamente em descrédito. Porém, olhando apenas para modelos descritos nos seus artigos [8,9], verifica-se que eles se anteciparam de um modo notável às estruturas propostas por Crick e Watson [3], e por Caspar e Klug [4], para as partes proteicas dos vírus. Por exemplo, Wrinch propôs uma molécula na forma de um tetraedro truncado com 288 resíduos de aminoácido que se parece bastante com algumas das construções icosaédricas.

Não encontrei qualquer referência aos trabalhos de Wrinch nas publicações de Klug e Caspar: no entanto, eles tinham podido encontrar conteúdo precioso nos seus artigos, muito mais de acordo com os seus próprios interesses do que as cúpulas de radar e estádios desportivos construídos por Buckminster Fuller.

Qual a lição a retirar daqui: que a ciência é rancorosa, que estar errado é um pecado mortal, e que o esquecimento em vez da absolvição é o resultado frequente! Muitas vezes, porém, o historiador de ciência tem visto, quão proveitoso pode ser, num campo, um conceito que se tornou de valor duvidoso no seu domínio original. Aqui está um bom problema para filósofos de ciência: o que significa «estar correcto»?

Agradecimentos

Apresento os meus agradecimentos pela hospitalidade de Susan L. Boone, e pelo apoio dos empregados da Coleção de Sophia Smith, no Colégio Smith, onde consultei os artigos de Dorothy Wrinch em 4 de Maio de 1982.

Referências

- [1] A.L. Machay, Iz. Jugoslav. centra za kristalog., **10**, 15-36 (1975).
[2] M.R. Hoare, Adv. Chem. Phys., **40**, 49 (1979).

- [3] F.H.C. Crick, e J.D. Watson, Nature, **177**, 473-475 (1956).
[4] D.L.D. Caspar, e A. Klug, Cold Spring Harbor Symp. Quant. Biol., **27**, 1-24 (1962).
[5] L. Makowski, em Biological Recognition and Assembly, A.R. Liss, New York, 1980, pp. 233-258.
[6] M. Goldberg, Tohoku Math. J., **43**, 104-108 (1937).
[7] D.L.D. Caspar, Biophys. J., **10**, 103-138 (1980).
[8] D.M. Wrinch, Nature, **139**, 972-973 (1937).
[9] D.M. Wrinch, Proc. Roy. Soc. London, **A161**, 505-524 (1937).

Convite à Reflexão...

Suspensão Coloidal

*Penso no ser poeta, e andar disperso
na voz de quem a não tem;
no pouco que há de mim em cada verso,
no muito que há de tudo e de ninguém.*

*Anda o cego a tocar La Violetera,
e eu a vê-lo, e a cegar;
e a pobre da mulher esfregando e pondo a cera,
e eu a vê-la, e a esfregar.*

*Que riso perto, que aflição distante,
que ínfima débil, breve coisa nada,
iça, ao fundo, esta draga carburante,
rasga, revolve e asfalta a subterrânea estrada?*

*Postulados e leis e lemas e teoremas,
tudo o que afirma e jura e diz que sim,
teorias, doutrinas e sistemas,
tudo se escapa ao autor dos meus poemas.
A ele, e a mim.*

António Gedeão, «Poesias Completas»

instrumentos de laboratório e científicos lda

LISBOA ~ PORTO ~ PONTA DELGADA

AA - ICP - FT-IR - UV - VIS - GC - HPLC
TERMO ANÁLISE - BIOQUÍMICA - UV - NIR

PERKIN ELMER

ESPECTROMETRIA DE MASSA

**Finnigan
MAT**

Alltech

ACESSÓRIOS

CROMATOGRAFIA

REPRESENTANTE EXCLUSIVO

CRISON

PH - CONDUCTIVIMETROS - TITULADORES

BALANÇAS ELECTRONICAS

COBOS
precisión

AGITADORES - KJELDAHL - DIGEST. VAPODEST

Gerhardt

ATAGO ~ ASTELL ~ ELMA ~ FISHER SCIENTIFIC ~ J.U.M.

HANSATECH ~ INGOLD ~ T. D. F. ~ ORBECO / HELLIGE