

BIOMOLÈCULES 3D

Biomolècules 3D I. GLÚCIDS

Les molècules que constitueixen els éssers vius s'anomenen biomolècules. La bioquímica és la part de les ciències biològiques que estudia les biomolècules.

Distingim dos grups de biomolècules:

- Biomolècules inorgàniques, com ara: aigua, oxigen gasos, diòxid de carboni gasos i sals minerals.
- Biomolècules orgàniques, com ara: glúcids o hidrats de carboni, lípids o greixos, proteïnes i àcids nucleics.

Totes les biomolècules orgàniques estan formades per cadenes d'àtoms de carboni. A més del carboni, els àtoms més abundants són: oxigen, hidrogen, nitrogen, fòsfor i sofre.

Una sola cèl·lula bacteriana conté unes 5.000 substàncies orgàniques diferents. I una cèl·lula eucariota conté unes 10.000 substàncies diferents. Les biomolècules són idèntiques en tots els éssers vius. En la natura, alguns organismes a través de la fotosíntesi, sintetitzen biomolècules orgàniques a partir de molècules inorgàniques. Per exemple, les plantes sintetitzen glucosa a partir de CO_2 atmosfèric i aigua.

L'estructura i la reactivitat química de les biomolècules permet que aquestes actuïn com **elements estructurals** i **funcionals** dins les cèl·lules. Així hi ha glúcids de reserva energètica (midó en els vegetals o glicogen en els animals). Alguns lípids formen part de les membranes cel·lulars, d'altres lípids són una font energètica important pel metabolisme cel·lular. Les proteïnes són essencials pel funcionament dels éssers vius. Els àcids nucleics constitueixen el material hereditari dels organismes, etc.

Per comprendre com les biomolècules intervien en tots aquests aspectes de la natura necessitem conèixer la composició de les molècules i la seva estructura tridimensional. Per això us proposem una sèrie d'activitats i recursos que ens permetran estudiar, visualitzar i manipular biomolècules, concretament glúcids.

Comencem:

Els glúcids són biomolècules formades per carboni (C), hidrogen (H), i oxigen (O) en una proporció semblant a $\text{C}_n\text{H}_{2n}\text{O}_n$. En tots els glúcids sempre hi ha un

grup carbonil, un carboni unit a un oxigen mitjançant un doble enllaç. El grup carbonil pot ser un **grup aldehid** (-CHO) o un **grup cetona** (-CO-).

Els glúcids es classifiquen en **monosacàrids**, **disacàrids** i **polisacàrids**.

1.1. Monosacàrids

Són molècules formades per cadenes carbonades de tres a set àtoms de carboni, on cada carboni té una funció **alcohol** (-OH), excepte un que té el grup **carbonil**.

Tots els monosacàrids excepte la cetotriosa tenen 1 o més **carbonis asimètrics** (tenen els quatre radicals del carboni diferents). Si el grup alcohol (-OH) està a la dreta de la molècula es diu, per conveni, que es de **configuració D**. Si el grup alcohol (-OH) està a l'esquerra, es diu de **configuració L**. D o L es refereix a la configuració del carboni asimètric més distant del grup carbonil.

Per cada carboni asimètric existeix dos estereoisòmers (una molècula és la imatge especular de l'altra molècula). A la natura predominen els glúcids de configuració D. **Una prova que la forma tridimensional és molt important per la seva funció biològica.**

Químicament els estereoisòmers són idèntics, però físicament tenen la capacitat de fer girar el pla de llum polaritzada cap a la dreta (**D**) o cap a l'esquerra (**L**). Els compostos que no tenen carbonis asimètric no fan girar la llum polaritzada.

La **glucosa** i la **fructosa** són dos monosacàrids de 6 carbonis (hexoses). Ambdues tenen la fórmula molecular $C_6H_{12}O_6$. En canvi la fórmula estructural, és a dir, la relació que hi ha entre els àtoms, és diferent.

- Busqueu i representeu la forma lineal de les dues molècules, glucosa i fructosa, i assenyaleu el grup carbonil en cada una d'elles. Aquí teniu algunes webs on podeu trobar informació:



[Carbohidratos o glúcidos - Estructura Química](#)
Scientific Phsyhic



[Azúcares o glúcidos](#)
Hipertextos del Área de Biología-UNNE



[Carbohidratos](#)
The Medical Biochemistry Page

En dissolució es produeix la ciclació dels monosacàrids de 5 o més carbonis. Quan això passa apareix un **nou enllaç**:

- En el cas de la glucosa, el nou enllaç s'estableix entre el grup aldehid del C1 (carboni 1) i el grup alcohol del C5 (carboni 5).
- En el cas de la fructosa, el nou enllaç s'estableix entre el grup cetona del C2 (carboni 2) i el grup alcohol del C5 (carboni 5).

Aquests carbonis (C1 de la glucosa o C2 de la fructosa), perden el doble enllaç amb l'oxigen, raó per la qual es converteixen en carbonis asimètrics. S'anomenen **anomèrics**, i presenten un grup -OH nou. Segons la posició d'aquest grup, s'originen els isòmers **alfa** o **beta**. Aquest grup -OH té poder reductor.

- Observeu aquesta animació i comenteu-la amb el vostre company:



[Interconversión de las formas alfa y beta de la glucosa en agua](#)
SEBBM

Després d'instal·lar a l'ordinador la "[màquina virtual de java](#)" (JVM o Java Plugging).

- Aneu a la pàgina següent i escolliu monosacàrids.



[Bioquímica estructural](#)
Biomodel

- Podeu observar la forma ciclada de la glucosa i la fructosa. Expliqueu les diferències que observeu entre elles.
- Observeu la imatge de la glucosa en 3D. Canvieu els àtoms de color indicant el color que heu utilitzat. Feu una còpia de la imatge de la molècula de glucopiranosada colorejada i enganxeu-la aquí: (potser us caldrà fer una impressió de pantalla). Assenyaleu el carboni anomèric.
- És una forma alfa o beta? Quin criteri heu fet servir per identificar-la?
- Observeu la imatge de la fructosa en 3D. Canvieu a la forma de boles i varilles, i canvieu el color dels àtoms indicant el color que heu utilitzat. Finalment enganxeu-la aquí.
- Per acabar, aneu a la guia didàctica, i escolliu autoavaluació, glúcids. Comprovareu què heu après!!

1.2. Disacàrids

Es formen per la unió de dos monosacàrids. En la reacció de formació o condensació del disacàrid es desprèn una molècula d'aigua, i els monosacàrids queden enllaçats per un àtom d'oxigen. S'anomena **enllaç glucosídic**.

Pot ser **enllaç glucosídic monocarbonílic**, quan l'enllaç s'estableix entre el carboni carbonílic (C anomèric) del primer monosacàrid i un carboni no carbonílic del segon monosacàrid. O pot ser **enllaç glucosídic dicarbonílic**, quan l'enllaç s'estableix entre els dos carbonis carbonílics dels dos monosacàrids. En aquest cas el disacàrid perd el poder reductor.

L'enllaç glucosídic pot ser trencat per hidròlisi, en aquest cas s'incorpora una molècula d'aigua en l'enllaç i s'obté els dos monosacàrids per separat.

Un dels monosacàrids és la **sacarosa**. Observeu aquesta animació:



[Sacarosa](#)
Proyecto Biosfera

- Per què l'enllaç que es forma entre la glucosa i la fructosa es diu $\alpha(1-2)$?
- Aquest enllaç glucosídic és monocarbonílic o dicarbonílic?
- Torneu a la pàgina següent i escolliu disacàrids.



[Bioquímica estructural](#)
Biomodel

- Feu una còpia de la molècula de sacarosa marcant l'enllaç glucosídic i els carbonis que intervenen en l'enllaç.
- Completeu la següent taula d'aquets dos disacàrids. Podeu buscar informació en les tres webs de l'apartat de monosacàrids.

Disacàrid	Fórmula estructural	Monosacàrids que formen el disacàrid	Tipus d'enllaç glucosídic
MALTOSA			
LACTOSA			

1.3. Polisacàrids

Són glúcids formats per la unió de molts monosacàrids. S'uneixen per mitjà de l'enllaç glucosídic, amb la pèrdua consegüent d'una molècula d'aigua per cadascun dels enllaços. Tenen pesos moleculars molt elevats.

- Torneu a la pàgina següent i escolliu polisacàrids.



[Bioquímica estructural](#)
Biomodel

- Indiqueu les semblances i diferències entre els polisacàrids: amilasa i amilopectina. Feu una còpia de les molècules i indiqueu quins enllaços intervenen.
- Compareu el glicogen i la cel·lulosa. Feu una còpia de les molècules i indiqueu quins enllaços intervenen.
- En què es diferencien aquestes 4 molècules entre elles? Ompliu el quadre resum:

Molècula	Tipus d'enllaç glucosídic	Funció
Cel·lulosa		
Glicogen		
Amilosa		
Amilopectina		

- Quins enzims penseu que són els més abundants, els que hidrolitzen els enllaços alfa glucosídics o els que hidrolitzen els beta glucosídics? Raoneu la vostra resposta.

Biomolècules 3D II. LÍPIDS

Els lípids són biomolècules orgàniques formades pels mateixos àtoms que els glúcids, carboni (C), hidrogen (H), i oxigen (O). Químicament són un grup molt heterogeni de substàncies, tenen en comú la característica de ser insolubles en aigua i solubles en dissolvents orgànics com l'èter, el cloroform, l'acetona. Els lípids proporcionen més del doble de l'energia que els glúcids.

Els lípids es classifiquen en:

- Lípids amb àcids grassos o saponificables.
- Lípids sense àcids grassos o insaponificables.

2.1 Àcids grassos (AG)

Són àcids orgànics formats per una **cadena hidrocarbonada** (de 4 a 24 àtoms de carboni) i un **grup carboxil** (-COOH). Són els precursors de la majoria de lípids.

La cua hidrocarbonada pot ser:

- **Saturada:** conté només enllaços simples entre els àtoms de carboni.
- **Insaturada:** conté un o més enllaços dobles entre els àtoms de carboni. Això fa que es distingeixin dues configuracions (**isòmers geomètrics**): si els H del doble enllaç estan situats en costats diferents, es diu de configuració **trans**. Si els H del doble enllaç estan situats en el mateix costat, es diu de configuració **cis**. A la natura els àcids grassos són **cis**. **Una altra prova que la forma tridimensional de les biomolècules és molt important per la seva funció biològica.**

En aquesta web teniu una mica més d'informació sobre els AG:



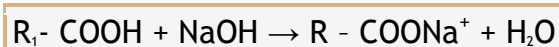
[Los ácidos grasos](#)
Proyecto Biosfera

Els greixos tenen diferent punt de fusió segons si els seus àcids grassos són saturats i insaturats. Els AG insaturats tenen punts de fusió més baixos, (ex: olis d'origen vegetal) mentre que els AG saturats tenen punts de fusió més alts (ex: greixos animals).

- Expliqueu per què el punt de fusió dels AG saturats és superior al punt de fusió dels AG insaturats.

Els AG en dissolucions bàsiques (NaOH, KOH) es disposen en micel·les convertint-se en **sabons** (sal d'àcid gras).

Reacció de saponificació:



Els sabons de Na⁺ o K⁺ són molècules **amfipàtiques** (el grup carboxil ionitzat és polar o hidròfil i la cadena hidrocarbonada és no polar o hidròfoba). Raó per la qual es formen micel·les que engloben en el seu interior partícules insolubles en aigua, per exemple greixos).

En aquesta animació podeu observar una reacció de saponificació:



[Reacción de Saponificación](#)
Proyecto Biosfera

- Quin àcid gras és el que reacciona en aquesta animació de la reacció de saponificació? Quants carbonis conté aquest àcid? És saturat o insaturat?
- Torneu a la web següent i escolliu dins dels lípids: àcids grassos. Seguiu les instruccions i observeu l'estructura dels quatre àcids grassos.



[Bioquímica estructural](#)
Biomodel

- En l'apartat de l'àcid oleic, es diu que té 18:1^{Δ9}. Què creieu que vol dir? També es diu que és un àcid gras monoinsaturat. Per què?

- En l'apartat de l'àcid linoleic, es diu que té 18:2 ^{Δ9,12}. Què creieu que vol dir?
- Comproveu que si cliqueu amb el botó dret del ratolí sobre la molècula, podeu escollir: *avanzado*, *elegir menú*, *usar menú completo de Jmol*. Comprovareu que hi ha moltes més opcions per manipular les molècules.
- Per practicar feu una captura de l'àcid oleic, on es vegi la molècula des de dalt, el fons taronja, els carboni 1, 18 i els carbonis del doble enllaç etiquetats.
- L'àcid linoleic i l'àcid linolènic s'anomenen àcids grassos essencials. Esbrineu què vol dir.

2.1 Acilglicèrids

Són èsters d'AG i glicerina (producte de la unió d'un àcid gras i un alcohol). Els àcids grassos esterifiquen els hidroxils de la glicerina. Per això es parla de:

- **Monoacilglicèrids (MAG):** format per glicerina i una àcid gras esterificat.
- **Diacilglicèrids (DAG):** format per glicerina i dos àcids grassos esterificats.
- **Triacilglicèrids (TAG):** format per glicerina i tres àcids grassos esterificats. També s'anomenen **triglicèrids o greixos**.

Els acilglicèrids davant de bases donen lloc a reaccions de saponificació, en les quals es produeix molècules de sabó.

Aneu a la següent web i observeu la formació dels acilglicèrids:



[Acilglicéridos](#)
Proyecto Biosfera

- Quins són els AG que intervenen en la formació dels MAG, DAG i TAG?
- Aneu a la web i escolliu dins dels lípids, triacilglicèrids:



[Bioquímica estructural](#)
Biomodel

- Feu la captura de la imatge que representa la molècula d'un acilglicèrid (1-palmitil-2-oleil-3-estearilglicerol) i assenyalau les diferents parts:
 - glicerol
 - 3 àcids grassos (indicant cadascun)

2.3 Ceres

Són èsters d'alcohols (diferent de la glicerina) i un AG. Tenen un marcat caràcter lipòfil (afinitat amb els lípids).



[Céridos](#)
Proyecto Biosfera

- Quants carbonis conté la molècula de cera d'abella? Per què és una molècula hidròfoba?

2.4 Fosfolípids

Contenen dues molècules esterificades d'AG en el primer i segon hidroxil (-OH) de la glicerina i el tercer hidroxil té un enllaç èster amb l'àcid fosfòric. Finalment l'àcid fosfòric també es troba esterificant un alcohol.

Els fosfolípids tenen una part polar hidròfila (cap: glicerina, àcid fosfòric i alcohol) i una part apolar hidròfoba (cues hidrocarbonades dels AG).



[Fosfoglicéridos y esfingolípido](#)
Proyecto Biosfera

- Quants enllaços èster hi ha en aquesta molècula?

Els fosfolípids són components estructurals de la membrana.

- Esbrineu quines característiques físico-químiques dels fosfolípids afavoreixen que siguin components de les membranes cel·lulars. Si voleu podeu consultar aquesta web:



[Lípidos](#)

Hipertextos del Área de Biología-UNNE

- Busqueu un esquema de l'estructura de la membrana cel·lular on s'indiqui els seus components.
- Com es diu el model de membrana amb el qual els biòlegs treballen actualment?
- Aneu a la web i escolliu dins dels lípids, fosfolípids
- Feu una captura de la imatge que representa la molècula d'un fosfolípid (dilauril fosfatidil etanolamina) , i identifiqueu les seves diferents parts (glicerina, àcids grassos, alcohol, fosfat). Identifiqueu també la part polar i l'apolar d'aquest fosfolípid.



[Bioquímica estructural](#)

Biomodel

2.5 Esteroides i colesterol

Són lípids sense àcids grassos o insaponificables. Tenen una estructura policíclica de quatre anells de carboni.

El colesterol se sintetitza en el fetge i és el precursor dels altres esteroides. També forma part de les membranes cel·lulars.



[Esteroides, isoprenoides y prostaglandinas](#)

Proyecto Biosfera

Torneu a la web i escolliu esteroides i seguïu les instruccions.



[Bioquímica estructural](#)

Biomodel

Biomolècules 3D III. PROTEÏNES

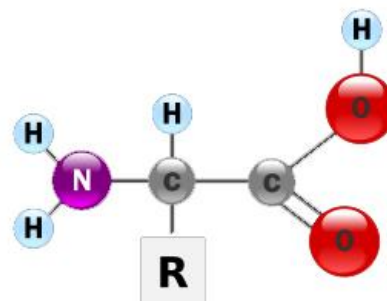
Les proteïnes són les biomolècules orgàniques més abundants. Constitueixen el 50% o més del pes sec de la majoria d'éssers vius. Realitzen moltes funcions (estructurals i funcionals) malgrat està construïdes només per vint unitats bàsiques o aminoàcids.

Una cèl·lula del nostre cos conté uns 100 milions de molècules proteiques.

3.1 Aminoàcids

Els aminoàcids (aa) estan constituïts per un carboni α asimètric unit a grup carboxil (-COOH), a un grup amino (-NH₂), a un àtom d'H i a un radical (R).

Tots els aa menys un (la glicina: Gly o G) tenen un carboni α asimètric. Per això presenten activitat òptica; poden desviar el pla de llum polaritzada cap a la dreta (**dextrogir** o +) o cap a l'esquerra (**levogir** o -).



Font:
http://www.rssynthesis.com/web_images/300px-aminoacidball_svg.png

Independentment de l'activitat òptica, un aa es diu que té **configuració D**, si quan es disposa en l'espai de manera que el grup carboxil quedi a dalt, el grup amino queda situat a la dreta, mentre que, si el grup amino es troba a l'esquerra, es diu que té **configuració L**.

En la natura, la forma L és la més abundant. **Una prova més prova que la forma tridimensional de les biomolècules és molt important per la seva funció biològica.**

Segons la naturalesa química del radical R, els aa es classifiquen en diversos grups. En aquesta web podeu veure un tipus de classificació:



[Clasificación de los aminoácidos en función de la naturaleza de su cadena lateral](#)
Universidad del País Vasco

- Aneu a l'apartat d'aminoàcids proteics, entreu a cada grup i orienteu la molècula de cada aa segons la fórmula de sota.
- Poleu les 7 icones que giren i contesteu els tests que hi ha a sota de la classificació.

3.2 Enllaç peptídic

Els aa poden unir-se de forma covalent a través d'un **enllaç peptídic**. S'estableix entre el grup amino d'un aa i el grup carboxil de l'altre aa i es forma una molècula d'aigua.

Observeu la següent animació:



[Las proteínas y los péptidos](#)
Proyecto Biosfera

- Quins són els quatre àtoms que formen part de l'enllaç peptídic?
- Els àtoms oxigen i nitrogen de l'enllaç es troben en posició cis o trans?

3.3 L'estructura de les proteïnes

Les proteïnes són polímers d'aminoàcids. La seqüència (l'ordre) dels aa ve determinat per les instruccions contingudes en els àcids nucleics (DNA i RNA). Es diu **estructura primària**.

Cada proteïna té la seva estructura primària determinada. Aquesta determina les particularitats estructurals de la molècula i la seva funció biològica. La variació de la seqüència, pot alterar o destruir la funció de la proteïna.

La seqüència d'aa (cadena polipeptídica) es pot ordenar de diferents maneres a l'espai. Aquesta disposició tridimensional es diu **conformació de la proteïna** i determina la seva funció biològica. Això és prova de que la forma tridimensional de les biomolècules és molt important per la seva funció biològica.

Aquesta conformació és a causa dels girs i plegaments que es produeixen en la cadena polipeptídica, i alhora de la rigidesa que suposa els enllaços peptídics.

Es formen enllaços dèbils entre els aa com ara ponts d'hidrogen o ponts disulfurs. Aquestes interaccions entre els aa dona lloc a dos **estructures secundàries**: hèlix α o làmina β .

- Observeu aquesta animació i expliqueu què representa.



[Protein Folding](#)
St. Olaf College

Aquestes estructures secundàries es poden replegar adoptant una configuració tridimensional determinada, es diu **estructura terciària**. N'hi ha de dos tipus: **fibrosa** o **globular**.

Finalment si la proteïna està formada per més d'una cadena polipeptídica, es diu **estructura quaternària**.

- Observeu la següent animació i feu una breu explicació del que representa.



[Protein Structure](#)
St. Olaf College

3.4 Desnaturalització de les proteïnes

Si s'altera la configuració d'una proteïna, perd la seva funcionalitat. És a dir, comprovem que l'estructura tridimensional és bàsica. Aquest procés es diu **desnaturalització**. Això es pot fer amb un augment de la temperatura, disminució del pH, per acció de dissolvents orgànics o detergents.

- A partir d'aquesta animació, feu una seqüència del procés de desnaturalització.



[Desnaturalización de las proteínas](#)
bionova.org

3.5 Funció de les proteïnes

- Cerqueu les diverses funcions que poden tenir les proteïnes i dieu un parell d'exemples de cada tipus.

Anem a treballar amb un altre visor molecular que es diu RasMol i chime és un plug-in que ens permetrà aplicar les propietats de RasMol a través d'un navegador.

- Entreu a la web següent i instal·leu el chime:



[Chime](#)
BioROM 2011

- Apreneu amb el/a professor/a les quatre normes necessàries per manipular les molècules que hi ha en la guia chime: possibles models moleculars, colors, selecció de grups,..
- Amb grups de dos o tres seguiu les instruccions de galeria i investiga.
- Finalment us ha arribat l'hora, feu les tres proves d'avaluació: crambina, ribonucleasa i citocrom 256.