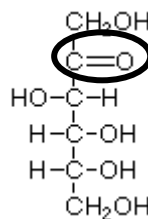
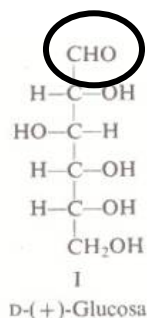


## Biomolècules 3D Guia didàctica

### 1. GLÚCIDS

#### 1.1. Monosacàrids

- 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:



D- Fructosa

- Aneu a la pàgina <http://biomodel.uah.es/model3j/inicio.htm> i escolliu monosacàrids.
- Podeu observar la forma ciclada de la glucosa i la fructosa. Expliqueu les diferències que observeu entre elles.

La glucosa es tanca entre el carboni 1 i el 5 i forma un hexàgon, el C1 és anomèric. La fructosa es tanca entre el carboni 2 i 5 i forma un pentàgon, el carboni 2 és anomèric.

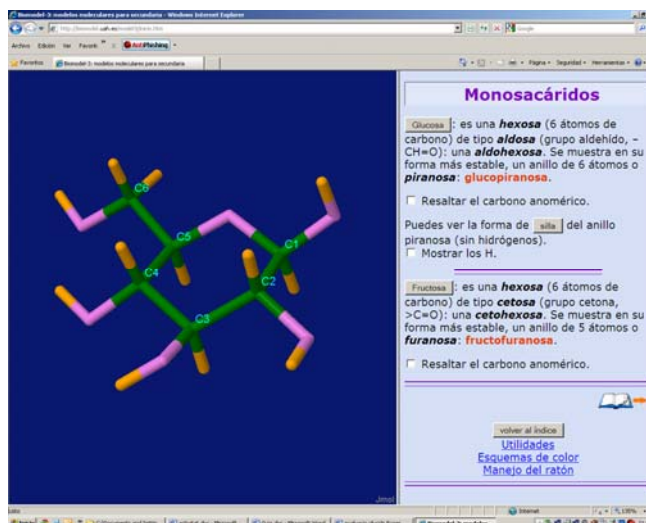
- Observeu la imatge de la glucosa en 3D. Canvieu els àtoms de color indicant el color que heu utilitzat. Feu una còpia de la imatge de la molècula de glucopiranososa colorejada i enganxeu-la aquí: (potser us caldrà fer una impressió de pantalla). Assenyaleu el carboni anomèric.

Hidrogen: taronja

Oxigen: rosa

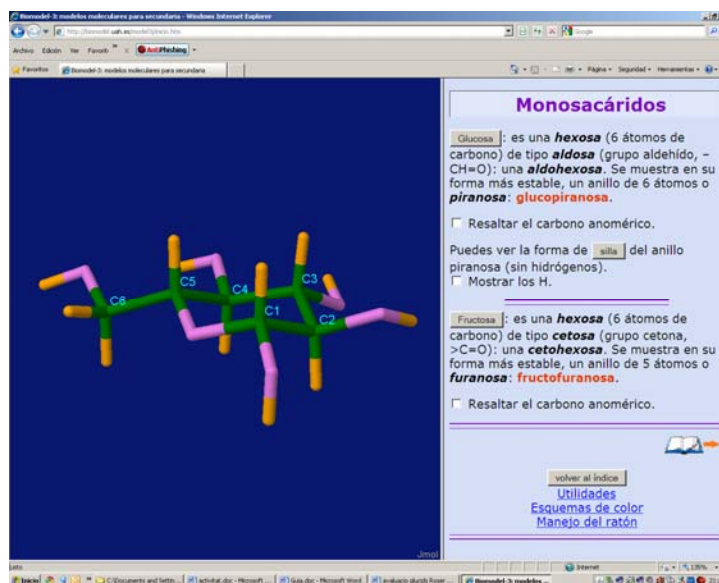
Carboni: verd

El C1 és anomèric



- És una forma alfa o beta? Quin criteri heu fet servir per identificar-la?

És una forma alfa perquè el grup alcohol (-OH) del C1 i el grup alcohol del C6 estan en diferent costat del pla de la molècula



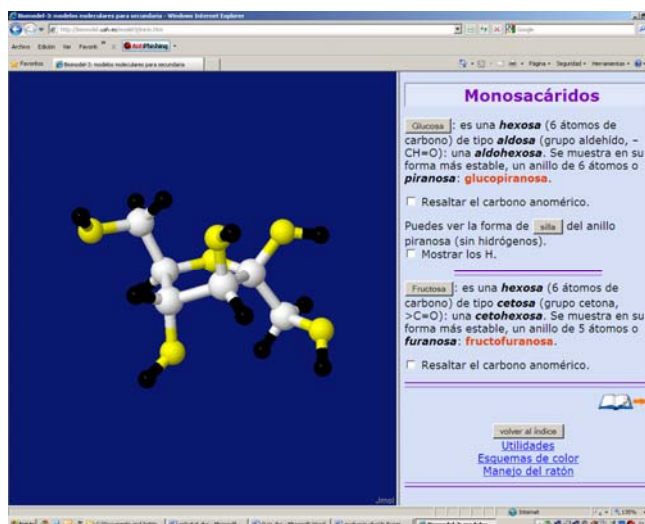
- Observeu la imatge de la fructosa en 3D. Canvieu a la forma de boles i varilles, i canvieu el color dels àtoms indicant el color que heu utilitzat. Finalment enganxeu-la aquí.

Hidrogen: negre

Oxigen: groc

Carboni: blanc

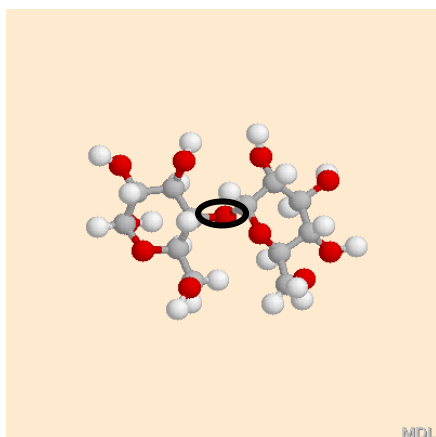
El C2 és anomèric



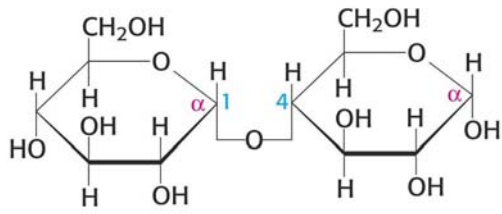
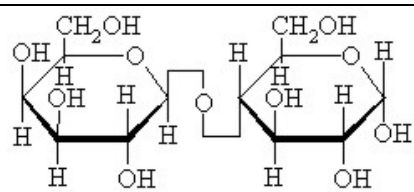
- Per acabar, aneu a la guia didàctica, i escolliu autoavaluació, glúcids. Comprovareu què heu après!!

## 2.1 Disacàrids

- Per què l'enllaç que es forma entre la glucosa i la fructosa es diu  $\alpha(1\rightarrow2)$   
Es diu  $\alpha$  (alfa) perquè la molècula de glucosa és de configuració  $\alpha$ , és a dir el C1 anomèric té l'OH en la banda contrària que el grup C6.  
I  $1\rightarrow2$  perquè l'enllaç s'estableix entre el C1 anomèric de la glucosa i el C2 anomèric de la fructosa. Per la qual cosa no té poder reductor.
- Aquest enllaç glucosídic és monocarbonílic o dicarbonílic?  
És dicarbonílic perquè intervenen els dos carbonis anomèrics.
- Torneu a la pàgina <http://biomodel.uah.es/model3j/inicio.htm> i escolliu disacàrids.
- 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 mososacàrids.

	Fórmula estructural	Monosacàrids que formen el disacàrid	Tipus d'enllaç glucosídic
Maltosa	 <p style="text-align: center;"><b>Maltosa</b> <b>(<math>\alpha</math>-D-Glucopyranosyl-(1→4)-<math>\alpha</math>-D-glucopyranose)</b></p>	Formada per dues molècules de glucosa	<input type="text" value="α(1--- 4)"/>
Lactosa	 <p style="text-align: center;"><b>Lactosa</b> <b><math>\beta</math>-D-galactopiranosil (1 → 4) <math>\alpha</math>-D-glucopiranososa</b></p>	Formada per la unió de glucosa i galactosa	<input type="text" value="β(1—4)"/>

- Torneu a la pàgina <http://biomodel.uah.es/model3j/inicio.htm> i escolliu polisacàrids
- Indiqueu les semblances i diferències entre els polisacàrids: amilosa i amilopectina. Feu una còpia de les molècules i indiqueu quins enllaços intervenen.

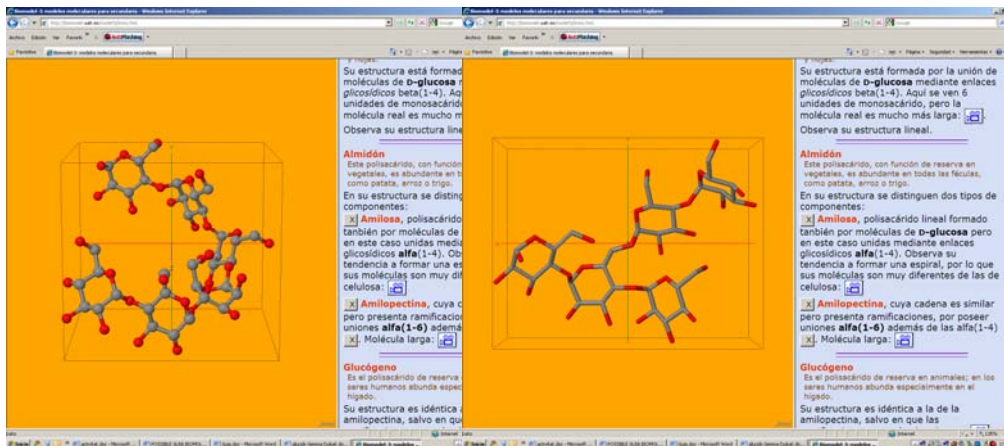
L'amilosa és una cadena lineal constituïda per molècules de D-glucosa  $\alpha(1-4)$  sense ramificacions.

L'amilopectina també està constituïda per molècules de D-glucosa  $\alpha(1-4)$ , però també hi ha ramificacions amb enllaços  $\alpha(1-6)$

Ambdós polisacàrids formen part del midó.

## Amilosa

## Amilopectina

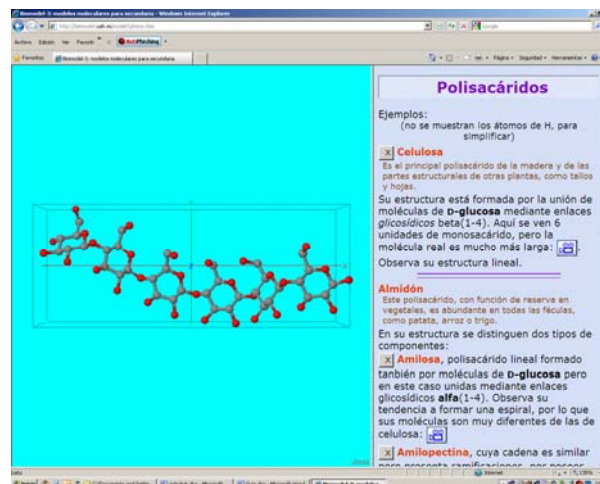


- Compareu el glicogen i la cel·lulosa. Feu una còpia de les molècules i indiqueu quins enllaços intervenen.

El glicogen té una estructura semblant a l'amilopectina, però més gran i més ramificada. Constituït per molècules D-glucosa i enllaços  $\alpha(1-4)$  i  $\alpha(1-6)$  en les ramificacions. És el glúcid de reserva dels animals.

La cel·lulosa és un polisacàrid format per 10.000 molècules de D-glucosa o més unides per enllaços  $\beta(1-4)$ . És insolubles en aigua, per això té una funció estructural en els vegetals.

## Cel·lulosa



- En què es diferencien aquestes 4 molècules entre elles? Ompliu el quadre resum:

	Tipus d'enllaç glucosídic	Funció
Cel·lulosa	molècules de D-glucosa o més unides per enllaços $\beta(1-4)$	Estructural
Glicogen	molècules D-glucosa i enllaços $\alpha(1-4)$ i $\alpha(1-6)$ en les ramificacions	Reserva energètica en animals
Amilosa	molècules de D-glucosa $\alpha(1-4)$ sense ramificacions.	Polímer de D-glucosa que representa el 20% del midó
Amilopectina	molècules de D-glucosa $\alpha(1-4)$ , i en les ramificacions amb enllaços $\alpha(1-6)$	Polímer de D-glucosa que representa el 80% del midó. El midó és el glúcid de reserva dels vegetals.

- 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

Els glúcids de reserva (midó i glicogen) estan constituïts per molècules de D-glucosa unides per enllaços alfa. Els éssers vius tenen molts enzims que poden hidrolitzar aquests polisacàrids i obtenir molècules de glucosa. Aquestes s'utilitzen en les vies catabòliques per obtenir energia.

El glúcid estructural dels vegetals (cel·lulosa) està constituït per molècules de D-glucosa unides per enllaços beta. La majoria d'éssers vius no disposen d'enzims per hidrolitzar aquests enllaços, la qual cosa afavoreix que els vegetals mantinguin la seva estructura. Els herbívors tenen en els seus budells bacteris en simbiosi que sí poden hidrolitzar enllaços beta i per tant permet a l'herbívor digerir la cel·lulosa.

## 2. LÍPIDS

### 2.1 Àcids grassos (AG)

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

Els AG saturats són cadenes hidrocarbonades lineals que faciliten enllaços dèbils (ponts d'hidrogen) entre elles, per la qual cosa el punt de fusió és alt. En l'animació els ponts d'hidrogen són les ratlletes taronges.

En canvi els AG insaturats són cadenes hidrocarbonades amb dobles enllaços, fet que produeix que no sigui lineal, i això dificulta que

s'estableixin ponts d'hidrogen (ratlletes violetes) entre molècules d'AG, formant unes estructures menys estables, amb punts de fusió més baixos.

- Quin àcid gras és el que reacciona en aquesta animació de la reacció de saponificació? Quants carbonis conté aquest àcid? És saturat o insaturat?

És l'àcid palmític, de 16 carbonis. És un AG saturat perquè no té dobles enllaços entre els carbonis.

- Torneu a la web:

<http://www2.uah.es/biomodel/model3j/redir.htm?monosac.htm>

i escolliu dins dels lípids: àcids grassos. Seguiu les instruccions i observeu l'estructura dels quatre àcids grassos.

En l'apartat de l'àcid oleic, es diu que té  $18:1^{\Delta 9}$ . Què creieu que vol dir? També es diu que és un àcid gras monoinsaturat. Per què?

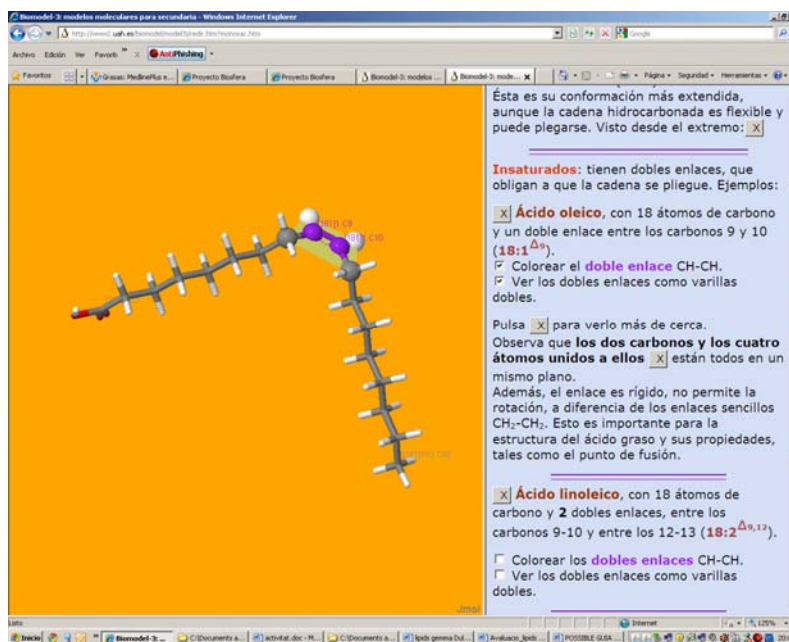
L'àcid oleic és un AG monoinsaturat només té un doble enllaç, en concret entre el carboni 9 i 10. En total té 18 C.

- En l'apartat de l'àcid linoleic, es diu que té  $18:2^{\Delta 9,12}$ . Què creieu que vol dir?

L'àcid linoleic és un AG amb dos dobles enllaços, un entre el carboni 9 i 10 i l'altre entre el carboni 12 i 13.

- 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.

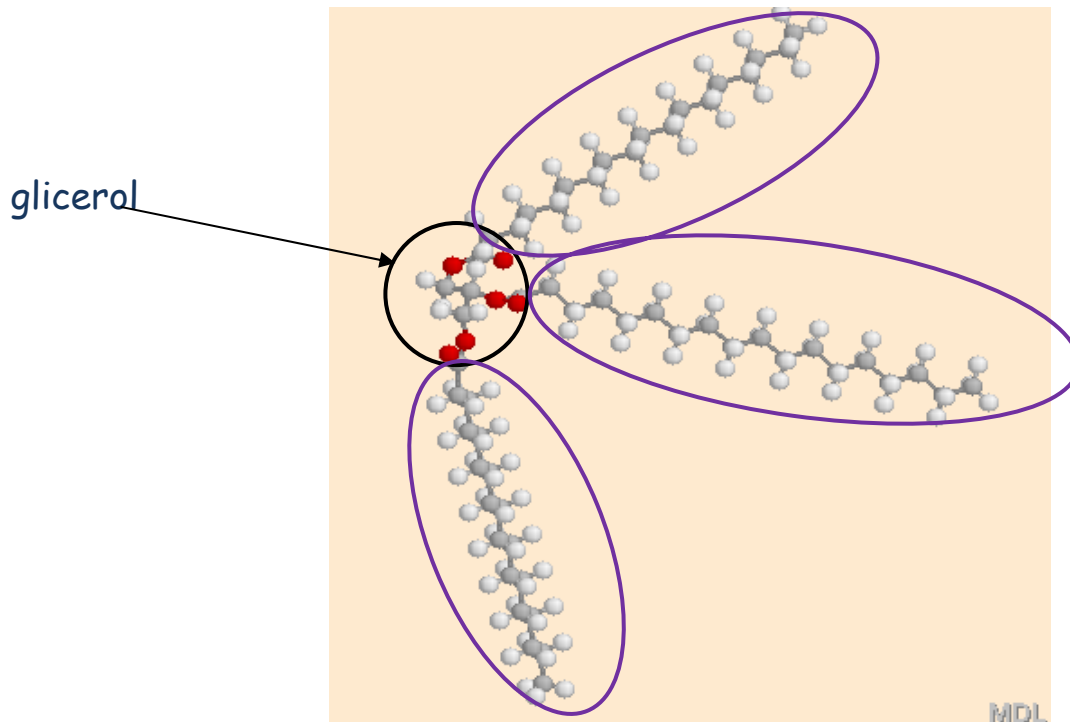
Per practicar feu una captura de l'àcid oleic, on es vegi la molècula des de dalt, el fons taronja, els carboni 1, 18 i els carbonis del doble enllaç etiquetats.



- L'àcid linoleic i l'àcid linolènic s'anomenen àcids grassos essencials. Esbrineu què vol dir?  
AG essencials significa que són biomolècules que els organismes no poden sintetitzar sinó cal ingerir-los amb la dieta. Aquests AG són indispensables per un bon creixement i desenvolupament dels organismes. La manca d'aquest AG provoca perturbacions diverses.

## 2.1 Acilglicèrids

- Quins són els AG que intervenen en la formació dels MAG, DAG i TAG?  
MAG: àcid palmític (AG saturat de 16 C)  
DAG: àcid palmitoleic (AG monoinsaturat de 16 C)  
TAG: àcid esteàric (AG saturat de 18 C)
- Aneu a la web i escolliu dins dels lípids, triacilglicèrids:  
<http://www2.uah.es/biomodel/model3j/redir.htm?monosac.htm>  
Feu la captura de la imatge que representa la molècula d'un acilglicèrid (1-palmitil-2-oleil-3-estearilglicerol ) i assenyaieu les diferents parts:
  - glicerol
  - 3 àcids grassos (indicant cadascun)
  - 3 àcids grassos



○ ÀCIDS GRASSOS.



### 2.3 Ceres

- Quants carbonis conté la molècula de cera d'abella? Per què és una molècula hidròfoba?  
17 carbonis. Perquè és una molècula apolar, sense càrrega, no pot establir ponts d'hidrogen amb molècules d'aigua i per atnt és hidròfoba.

### 2.4 Fosfolípids

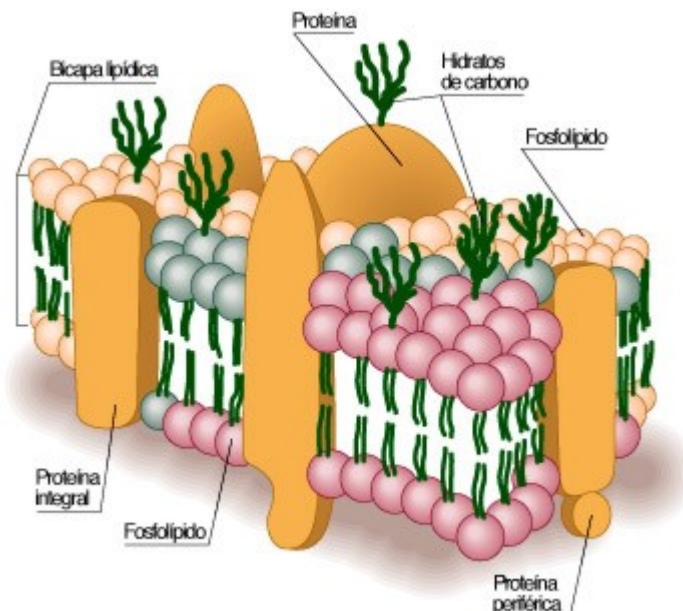
- Quants enllaços èster hi ha en aquesta molècula?  
Quatre enllaços èsters. Un amb la glicerina i àcid palmític, un segon amb la glicerina i l'àcid palmitoleic, un tercer amb la glicerina i l'àcid fosfòric i l'últim l'àcid fosfòric amb l'etanolamina.
- Esbrineu quines característiques físico-químiques dels fosfolípids afavoreixen que siguin components de les membranes cel·lulars. Si voleu podeu consultar aquesta web:

<http://www.biologia.edu.ar/macromoleculas/lipidos.htm>

Els fosfolípids són molècules amfipàtiques, és a dir tenen una part hidròfila i una part hidròfoba o lipòfila, de manera que de forma espontània en medis aquosos orienten les part polar cap el medi aquós i les parts apolar o hidròfiles cap a les parts lipòfiles de les altres molècules formant micel·les o bicapes de fosfolípids.

- Busqueu un esquema de l'estructura de la membrana cel·lular on s'indiqui els seus components.

Una possible imatge seria aquesta:



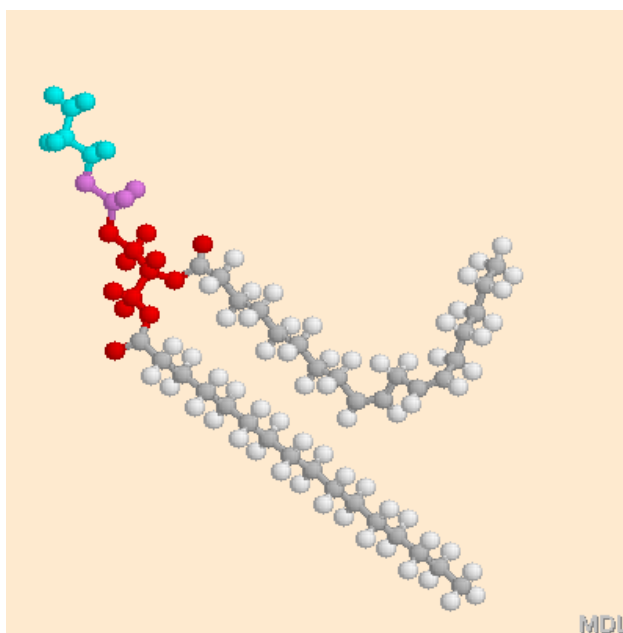
- Com es diu el model de membrana amb el qual els biòlegs treballen actualment?

S'utilitza el model proposat per Singer i Nicholson (1972) anomenat **model del mosaic fluid**, segons el qual la membrana plasmàtica està constituït per una doble capa de fosfolípids a la qual s'associen molècules proteiques i de colesterol.

- Aneu a la web i escolliu dins dels lípids, triacilglicèrids:

<http://www2.uah.es/biomodel/model3j/redir.htm?monosac.htm>

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.



CYAN: ALCHOL.  
LILA: FOSFAT.  
VERMELL: GLICERINA.  
GRIS/BLANC: ACIDS G.

Les cues (color gris/blanc) és apolar, la resta és polar.

## 2.5 Esteroides i colesterol

- Esbrineu per què els greixos saturats i el colesterol representen un problema per a la nostra salut? Si voleu podeu començar consultant aquestes webs:

Malgrat que el colesterol és un component necessari per les membranes cel·lulars, és un precursor d'hormones esteroides (ex: progesterona, testosterona), etc.. S'ha demostrat que hi ha una relació entre nivells alts de colesterol i risc de patir malalties cardiovasculars.

El colesterol, com tots els lípids són insolubles en aigua, per això es transporten pel corrent sanguini units amb proteïnes, formant **lipoproteïnes**. Hi ha bàsicament dos tipus de lipoproteïnes que transporten el colesterol: **HDL** (lipoproteïnes d'alta densitat) i **LDL** (lipoproteïnes de baixa densitat).

Les LDL estan constituïdes per una part proteica, **AG saturats** i colesterol. Les HDL estan constituïdes per una part proteica, **AG insaturats** i colesterol.

Les LDL abans de ser acceptats per les cèl·lules han d'interaccionar amb uns receptors de membrana. Un excés de LDL pot saturar aquests receptors, donant com a resultat un nivells alts de colesterol en sang. A més els AG saturats també poden reduir l'activitat d'aquests receptors.

Les HDL transporten el colesterol des de diferents teixits fins el fetge on és descomposat. Això redueix els nivells de colesterol a la sang i per tant ajuda a retirar les plaques de greix de l'aterosclerosi. A més els AG insaturats incrementen dels receptors dels LDL, per tant els LDL són retirats de la sang, millorant la relació entre HDL (colesterol bo) i LDL (colesterol dolent)

### 3. PROTEÏNES

#### 3.1 Aminoàcids

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

#### 3.2 Enllaç peptídic

- 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?  
L'oxigen, el carboni, el nitrogen i l'hidrogen. L'oxigen i el nitrogen estan en posició trans.

#### 3.3 L'estructura de les proteïnes

- Observeu aquesta animació i expliqueu què representa.  
<http://www.stolaf.edu/people/qiannini/flashanimat/proteins/hydropobic%20force.swf>

La línia negra i vermella representa la seqüència d'aminoàcids (estructura primària), els segments negres estan formats per aminoàcids hidròfils i els segments vermells per aminoàcids hidròfobs. Comprovem que a causa de la distribució dels aa la cadena peptídica es plega d'una determinada manera, on els aa hidròfobs queden a l'interior de la proteïna i els aa hidròfils queden disposats a l'exterior de la proteïna, establint ponts d'hidrogen amb l'aigua., i adoptant una estructura secundària concreta.

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

<http://www.stolaf.edu/people/qiannini/flashanimat/proteins/protein%20structure.swf>

En aquesta animació s'observa el plegament d'una proteïna, a partir d'una cadena d'aa, **estructura primària**. Aquesta es plega adoptant una **estructura secundària**, on hi ha trossos d'hèlix  $\alpha$  i trossos de làmina  $\beta$ . Al seu torn, l'estructura secundària es torna a replegar adoptant una configuració tridimensional determinada, **estructura terciària**, i finalment l'associació de diferents cadenes polipeptídiques constitueix una **estructura quaternària**.

### 3.4 Desnaturalització de les proteïnes

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

<http://www.bionova.org.es/animbio/anim/proteodesnat.swf>

Representa el procés de desnaturalització de les proteïnes de l'ou (tant de la clara com de la iema) per l'augment de la temperatura.

Una possible seqüència seria aquesta:

- Les proteïnes de la clara de l'ou es representen amb línies blaves replegades entre si que mantenen la seva estructura tridimensional gràcies als enllaços dèbils (línies vermelles) que s'estableixen entre els aa.
- Amb l'escalfor es trenquen els enllaços dèbils, perdent-se l'estructura tridimensional. No es veuen afectats els enllaços peptídics (són enllaços covalents, molt més forts)
- Es formen nous enllaços dèbils, donant lloc a noves configuracions tridimensionals. Les proteïnes han perdut la seva funcionalitat.

### 3.5 Funció de les proteïnes

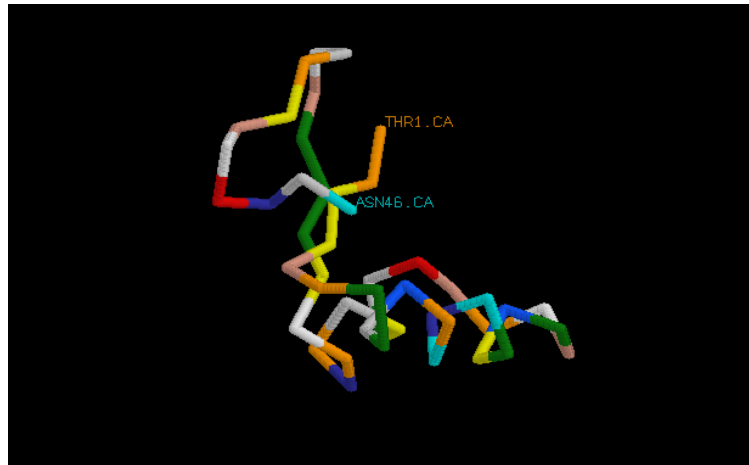
- Cerqueu les diverses funcions que poden tenir les proteïnes i dieu un parell d'exemples de cada tipus.

Les proteïnes realitzen moltes funcions, una manera de classificar-les és la següent:

- Enzims: lisozima, nucleases, catalasa, maltasa,..
- Proteïnes de transport: hemoglobolina, lipoproteïnes, permeases,..
- Proteïnes nutritives: l'albumina de l'ou, caseïna de la llet, ...
- Proteïnes contràctils: miosina, actina,..
- Proteïnes estructurals. Col·lagen, queratina, fibroïna,..
- Proteïnes immunodefensives: anticossos, toxines dels bacteris,..
- Proteïnes reguladores: insulina, glucagó,..

- Entreu a la web:  
<http://www.biorom.uma.es/contenido/proteinas3d/chimeguia/index.htm> i instal·leu el chime
- 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.

### 1.- Crambina:



1. ¿Cuántos Aa forman esta proteína?:

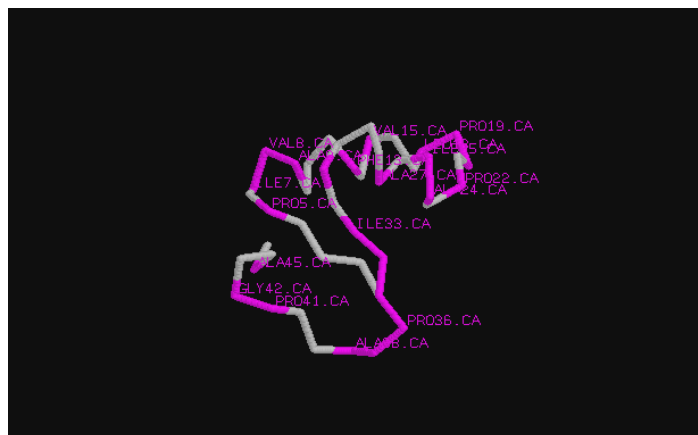
Aquesta proteïna la formen 46 aminoàcids

2. Indica el nombre del primer y último Aa:

El primer Aa és Treonina(THR), i l'últim és la Asparagina(ASN)

3. Indica el número de Aa hidrofóbicos que hay en la proteína:

Hi ha 22 Aa hidròfobs a la proteïna



#### 4. Analiza la estructura secundària y comenta los aspectos de interés



En aquesta proteïna hi veiem 2 estructures, la de hèlix alfa i la de làmina beta, de les quals n'hi ha dos de hèlix alfa i 3 de làmina Beta

5. ¿Podrían existir enlaces por interacción electrostática entre los siguientes residuos?:

A. Arg 17-Glu 36

B. Arg 17-Glu 23

C. Lys 27-Glu 13



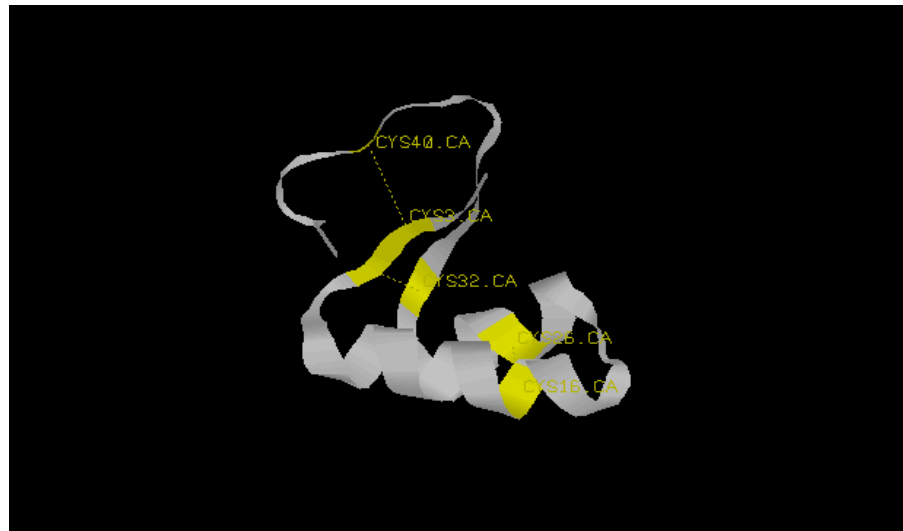
Poden existir enllaços electroestàtic entre la Arg 17-Glu 23 indicades a la figura

6. Indica entre qué residuos Cisteína existen puentes disulfuro.

Existeixen ponts de disulfur entre els residus els quals són:

1. CYS 3-CYS 40
2. CYS 3- CYS 32
3. CYS 26-CYS16

Indicats a la figura.



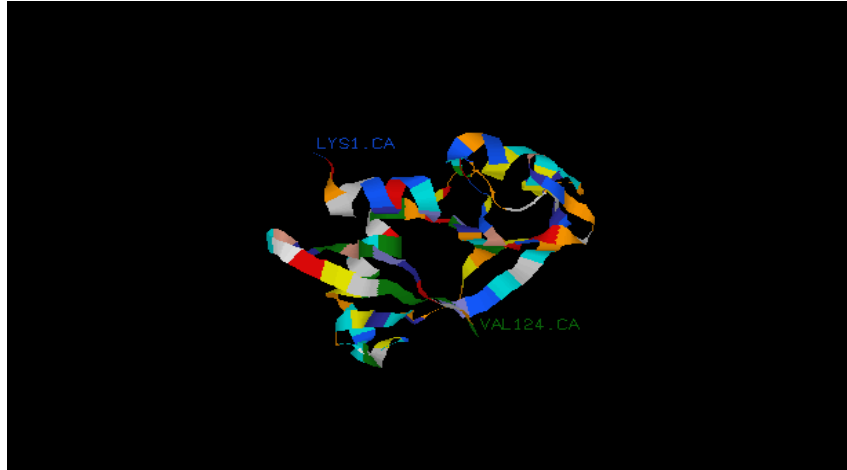
7. Consigue una imagen de esta molécula donde quede bien reflejada la estructura secundaria (modelo y color) de esta proteína e inclúyela en la hoja de evaluación. Para esto haz lo siguiente:

- Ten abiertos a la vez el navegador de páginas web y el documento word donde está escribiendo tus respuestas.
- Una vez que has manipulado la molécula y aparecen los aspectos estructurales que se te piden:
  - Activa el Menú contextual de Chime y copia en el portapapeles (Edit/Copy) una imagen de esta molécula.
  - Ve al documento word y pega la imagen del portapapeles (Edición/Pegar).



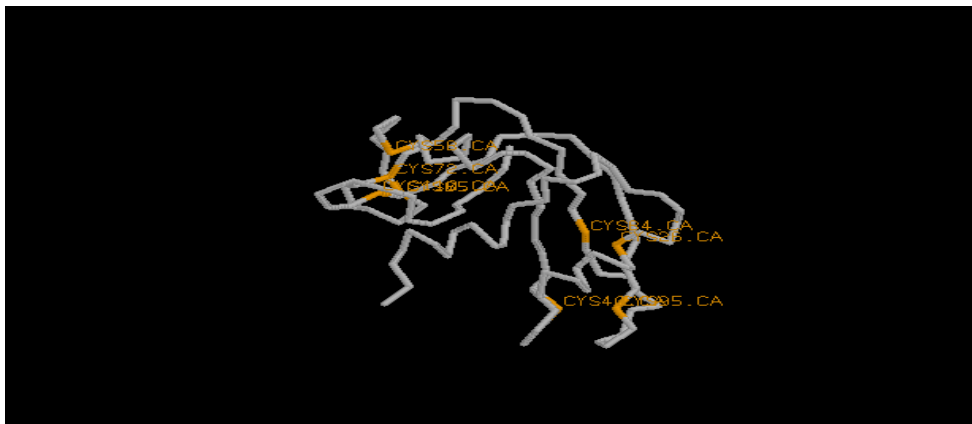
## 2.- ribonucleasa

1. ¿Cuántos Aa forman esta proteína? Indica el nombre del primer y último Aa



Aquesta proteïna la componen 124 aminoàcids. El primer aminoàcid és la Lisien lisina i l'últim la valina

2. Localiza los residuos cisteína y di qué posición ocupan:

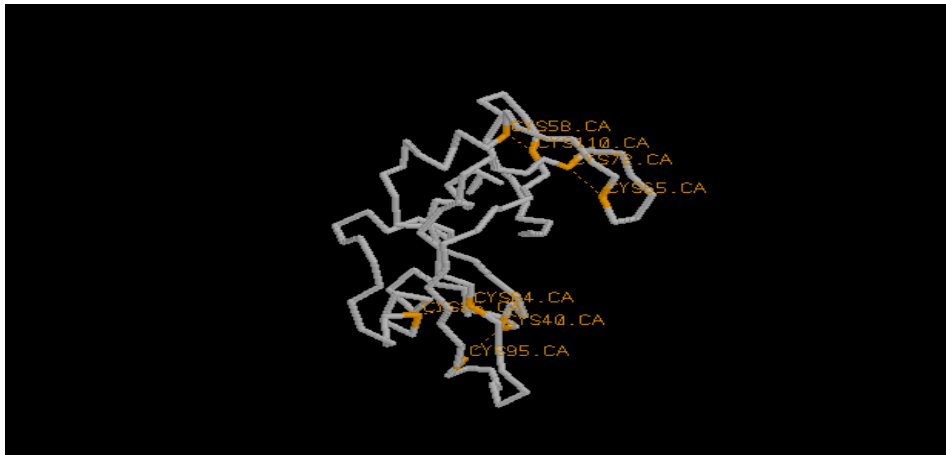


la posició que ocupen són:

CYS 95, CYS 40, CYS 26, CYS B4, CYS 110, CYS 72, CYS 65, CYS 5B, CYS D4, CYS 105



3. Visualiza los puentes disulfuro y consigue una imagen de esta molécula donde se vean bien estos puentes Para esto haz lo siguiente:

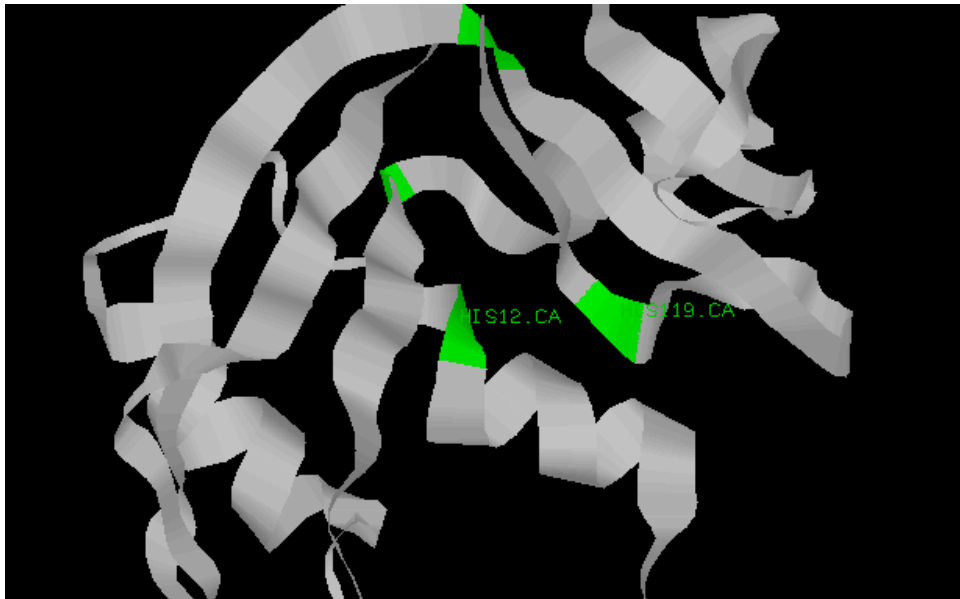


4. Analiza la estructura secundaria y comenta los aspectos de interés. ¿Dónde se localizan los residuos Prolina?



Els residus de Prolina estan marcats de color vermell

5. Localiza los residuos His-119 y His-12 que están en el centro activo de esta enzima e indica la estructura secundaria de los fragmentos peptídicos que contienen estos dos Aa



la estructura secundària en què estan aquests fragments és:

His 12: hèlix àlfa

His 119: lamina beta

### 3.- citocrom 256

1. ¿Cuántas subunidades peptídicas tiene esta proteína?



Aquesta proteïna conté 2 subunitats peptídiques

2. ¿Cuántas regiones alfa-hélice contiene? Consigue una imagen de esta molécula donde quede bien reflejada la estructura secundaria (modelo y color) de esta proteína e inclúyela en la hoja de evaluación.

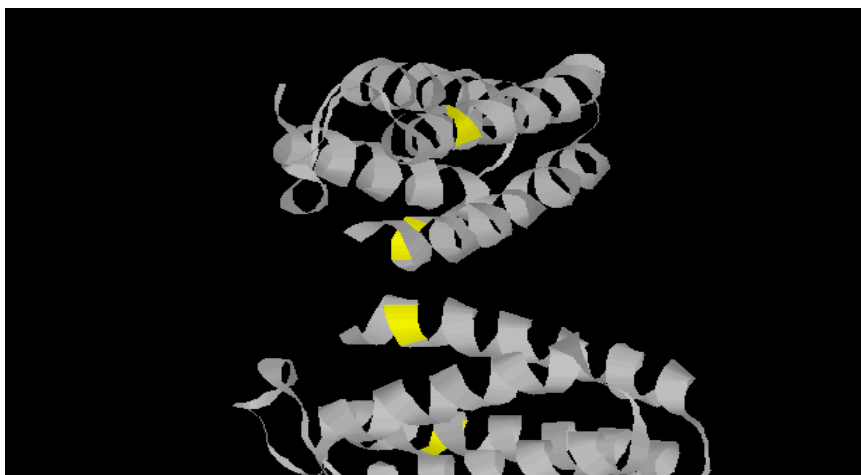
Cada una de les dos cadenes polipeptídiques contenen 3 regions Helix Alfa senyalades de color rosa, i 3 regions Lamina Beta senyalades de color blau.



3. ¿Contiene grupos prostéticos o ligandos?¿De qué tipo?

Hi ha ions i lligands.

4. ¿Analiza las Histidinas de las cadenas peptídicas y comenta algunos aspectos que te resulten de interés y que puedas relacionar con otras proteínas ya estudiadas en esta unidad.



Totes les Histidinas que apareixen en la molécula apareixen en les estructures secundaries d' Helix Alfa