

BLOCO 1 – ATIVIDADE 1

ESTRUTURA DAS BIOMOLÉCULAS

Autoria:

Elaine Machado Benelli (Departamento de Bioquímica e Biologia Molecular, UFPR)

Objetivo:

Visualizar as diferentes biomoléculas e compreender suas características estruturais e algumas propriedades físico-químicas.

Método:

Para visualizar as estruturas será utilizado o JMOL, um programa de visualização de estruturas química 3D de livre acesso, disponível online.

Background:

Nas representações moleculares, os átomos são representados por esferas das seguintes cores:

- . branco – Hidrogênio (H)
- . cinza – Carbono (C)
- . azul – Nitrogênio (N)
- . vermelho – Oxigênio (O)
- . amarelo – Enxofre (S)
- . laranja – Fósforo (P)

Comandos de movimento dos modelos estruturais no JSMOL:

- Aumentar e diminuir o tamanho: tocar sobre o modelo, pressionar a tecla shift ao mesmo tempo que move o mouse para frente ou para trás;
- Girar o modelo: Apertar o botão esquerdo do mouse e movimentá-lo da esquerda para a direita.

ATENÇÃO: Fotografar todos os passos para adicionar no relatório final.

1) ÁGUA

1.1) Estrutura:

<http://www.biotopics.co.uk/jsmol/watersingle.html>

Esta imagem representa a estrutura da água. Ao clicar em “Click to see/ hide more detail about electron in water”, você será capaz de observar a distribuição e compartilhamento de elétrons entre os átomos de H e O.

- a) A ligação entre H e O é de que tipo?
- b) Esta ligação pode ser quebrada quando a água passa do estado líquido para gasoso?

Clicando em “Show/remove lone pairs (eletron probability envelopes)” aparecerá para você a região que corresponde a posição dos dois pares de elétrons não compartilhados do O. A seguir, clicar em “MEP - (blue:+ve, red -ve)/ MEP off”. Você será capaz de visualizar uma região vermelha que representa polaridade negativa devido a densidade maior de elétrons e em azul a polaridade positiva devido a maior densidade de prótons.

a) Esta diferença de polaridade pode favorecer algum tipo de ligação? Explique.

1.2) Pontes de hidrogênio na água (líquido)

<http://www.biotopics.co.uk/jsmol/waterHbonds.html>

Esta imagem representa a estrutura da água líquida. Ao clicar em “Show...hide H bonds”, aparecerão em azul as ligações de H.

- Se aquecermos a água 100°C o que acontece com este tipo de ligação? Explique.
- Por que este tipo de ligação acontece entre O e H e não entre átomos de O ou átomos de H?
- Quantas ligações de H são observadas por molécula de água?

1.3) Pontes de hidrogênio na água (sólido)

<http://www.biotopics.co.uk/jsmol/ice.html>

Esta imagem representa a estrutura da água no estado sólido. Ao clicar em “Show...hide H bonds”, aparecerão em azul as ligações de H.

- Quantas ligações de H são observadas pelas moléculas de água mais centrais?
- O que acontece com estas ligações de H na passagem do estado sólido para o líquido?

1.4) Movimentação das moléculas

<http://www.biotopics.co.uk/jsmol/watermoving.html>

- Poderíamos afirmar que a estrutura organizada da água líquida é estática?

2) CARBOIDRATOS

2.1) No canto superior esquerdo da página do JSMOL em “3D molecules”, existe uma lista de biomoléculas.

- Escolha carboidratos e, apenas observando as estruturas que aparecem para cada carboidrato escolhido, classifique cada uma das estruturas em: monossacarídeos, dissacarídeos, oligossacarídeos ou polissacarídeos. Explique a diferença entre eles.
- Discuta o fato de a estrutura linear dos monossacarídeos conferir “poder redutor” a essas moléculas. Leve em conta o uso desta propriedade para detecção destas moléculas com reagente de Benedict.
- Um dos polissacarídeos contidos no banco é a amilopectina. Que particularidade ela confere aos alimentos onde se encontra? Leve em conta em sua resposta a interação desta molécula com a água.

2.2) Glicose

<http://www.biotopics.co.uk/jsmol/glucose.html#>

- A molécula de glicose é formada por quais átomos e qual a quantidade?

- b) Como as ligações entre estes átomos pode ser quebrada? Explique
- c) Observando as características dos átomos presentes na molécula de glucose e a sua distribuição, podemos considerar esta molécula polar ou apolar? Por quê?

Ao clicar em “open-chain form in which Carbon 1 forms a CHO aldehyde group”, será possível visualizar a forma aberta da glucose.

- d) Qual das formas é mais comum nos seres vivos? Por que?

2.3) Galactose e glicose

http://www.biotopics.co.uk/jsmol/galactose_and_glucose.html

- a) Este link mostra as estruturas da galactose (esquerda) e da glicose (direita). Conte os átomos e escreva a fórmula molecular da galactose e da glicose.
- b) Clique em “different directions” e coloque o carbono marcado em amarelo (C4) em ambas as estruturas para o lado esquerdo, deixando o anel do monossacarídeo de frente para você. Observe a posição espacial dos átomos ligados ao C4 em cada um dos monossacarídeos. Podemos dizer que a topologia destas moléculas é a mesma?
- c) Qual a implicação biológica desta diferença?
- d) Que tipo de isomeria é observada entre as moléculas de glicose e galactose? Explique.

Continue analisando os carboidratos abaixo no website:

- e) Por que o anel formado pela frutose é diferente daquele formado pela glucose apesar de ambas conterem 6C?
- f) Observe as estruturas da ribose e desoxirribose e descreva a diferença entre os dois monossacarídeos.
- g) Quais são os polissacarídeos que formam o amido? Descreva as suas estruturas 3D quanto a composição, a forma, a presença ou ausência de ramificações e tipos de ligação no ponto de ramificação e ao longo da estrutura.
- h) Compare a estrutura do glicogênio e amido. (Composição, estrutura, ramificações, ligações entre os monossacarídeos)
- i) Como as ligações glicosídicas são quebradas nos organismos vivos?
- j) Que grupos funcionais participam da formação de uma ligação glicosídica?
- k) Analise a estrutura da celulose (composição, estrutura, tipo de ligação entre os monossacarídeos e presença ou não de ramificação).
- l) Compare as estruturas 3D da celulose e amilose. Por que são diferentes? Quais as implicações biológicas destas diferenças?
- m) A polaridade destes polissacarídeos é semelhante ou não? Explique.

3) LIPÍDEOS

3.1) Ácidos graxos

<http://www.biotopics.co.uk/jsmol/fattyacids.html>

Neste link podemos observar as estruturas de dois ácidos graxos, um saturado à esquerda e outro insaturado à direita.

- a) Em geral os ácidos graxos apresentam 2 partes, com polaridades diferentes. Identifique estas partes e explicar a origem desta diferença de polaridade.
- b) Por que uma dupla ligação entre carbonos é capaz de alterar a conformação do ácido graxo saturado?

3.2) Glicerol

<http://www.biotopics.co.uk/jsmol/glycerol.html>

Neste link podemos observar a estrutura do glicerol. Ele é um dos componentes do triacilglicerol, que pode ser visualizado no link:

<http://www.biotopics.co.uk/jsmol/triglyceride.html>

Clicando em “ester links” nesta estrutura é possível observar a ligação do tipo ester entre glicerol e ácidos graxos.

- a) Quais grupos funcionais participaram da formação dessa ligação?
- b) Qual é a função biológica dos triacilgliceróis?
- c) Observando as estruturas de ácidos graxos e glicerol isoladamente (I) e posteriormente ligados no triacilglicerol (II). Caracterize I e II quanto a solubilidade em água e óleo vegetal. Explique.
- d) O que é mais interessante para organismos ter uma reserva solúvel ou insolúvel em água? Explique.
- e) Antigamente, nossos avós fabricavam sabão misturando soda caustica com gordura animal em alta temperatura. O que acontece neste processo?
- f) Qual é a função de sabão na remoção da gordura de uma panela? Desenhe e explique.
- g) Compare a polaridade do diacilglicerol (http://www.biotopics.co.uk/jsmol/mono_and_diglycerides.html) com fosfolípido (http://www.biotopics.co.uk/jsmol/mono_and_diglycerides.html)
- h) Análise <http://www.biotopics.co.uk/jsmol/bilayer.html> e responda por que este tipo de estrutura acontece em membranas?
- i) Dentro do programa entre no tópico “vitaminas” e observe as estruturas de todas elas. Em geral, as vitaminas são classificadas em lipossolúveis e hidrossolúveis. Observando estas estruturas, explique quais as características estruturais e de composição que influenciam na solubilidade destas moléculas?

4) PROTEÍNAS

4.1) Estrutura dos aminoácidos

http://www.biotopics.co.uk/jsmol/aa_categories.html

- a) Abra o link do aminoácido “alanina” e movimente sua estrutura, deixando o C α no centro, grupo amino à esquerda, carboxílico a direita e o grupo R (cadeias laterais) para baixo. Fotografe e insira a figura aqui.
- b) Abra os links dos aminoácidos “glicina”, “alanina”, “isoleucina”, “leucina”, “metionina” e “valina”, posicionando os aminoácidos como descrito no item 4.1.a. Observe as cadeias laterais destes aminoácidos. Quais os átomos que são encontrados? Qual a polaridade destes grupos R? Explique.
- c) Abra os links dos aminoácidos “arginina”, “lisina” e “histidina”, posicionando os aminoácidos como descrito no item 4.1.a. Observe as cadeias laterais destes

aminoácidos. Quais os átomos que são encontrados? Qual a polaridade destes grupamentos R? Explique.

- d) Abra os links dos aminoácidos “aspartato” e “glutamato” posicionando os aminoácidos como descrito no item 4.1.a. Observe as cadeias laterais destes aminoácidos. Quais os átomos que são encontrados? Qual a polaridade destes grupamentos R? Explique.
- e) Abra os links dos aminoácidos “triptofano”, “tirosina” e “fenilalanina”, posicionando os aminoácidos como descrito no item 4.1.a. Observe as cadeias laterais destes aminoácidos. Quais os átomos que são encontrados? Qual a polaridade destes grupamentos R? Explique.
- f) Abra os links dos aminoácidos “treonina”, “serina” e “cisteína”, posicionando os aminoácidos como descrito no item 4.1.a. Observe as cadeias laterais destes aminoácidos. Quais os átomos que são encontrados? Qual a polaridade destes grupamentos R? Explique.
- g) Abra os links dos aminoácidos: “asparagina” e “glutamina”, posicionando os aminoácidos como descrito no item 4.1.a. Observe as cadeias laterais destes aminoácidos. Quais os átomos que são encontrados? Qual a polaridade destes grupamentos R? Explique.
- h) Quais os dois aminoácidos que apresentam enxofre em suas cadeias laterais? Ambos podem formar pontes de sulfeto na estrutura de proteínas? Por quê?

4.2) Ligação peptídica

<http://www.biotopics.co.uk/jsmol/leuala.html>

- a) Mova a estrutura colocando o N-terminal para esquerda. Identifique a ligação peptídica. Fotografe e coloque aqui. Os átomos envolvidos nesta ligação estão no mesmo plano? Por quê?
- b) Que grupos funcionais participaram desta ligação?

4.3) Estrutura tridimensional

<http://www.biotopics.co.uk/jsmol/insulin.html>

- a) Neste link visualizamos a estrutura 3D no hormônio insulina. Clique em “Display A,B chains as ribbons”. Que tipo de estrutura é visualizada? Que região da cadeia polipeptídica corresponde aos desenhos observados?
- b) Coloque o eixo da estrutura visualizada em “a”, perpendicular ao plano de sua mesa de trabalho. Agora clique em “Show/ hide backbone H bonds”. Que tipo de interações são responsáveis por manter a estrutura observada em k?
- c) Clicar em “ball and sticks”. Agora, podemos visualizar todos os átomos desta proteína. Qual a orientação das cadeias laterais dos aminoácidos?
- d) Clicar em “reset view” e clique em “Display A,B chains as ribbons”. Em seguida, clique em “Display cysteines”, em “show disulphide bridges” e finalmente em “Show/ hide backbone H bonds”.
- e) Qual o maior nível estrutura da insulina? Quais os tipos de interações responsáveis por manter este nível estrutura?
- f) Quais as estruturas secundárias observadas em sequência na cadeia A e na cadeia B? Que tipos de interações mantem a estabilidade destas estruturas?

5) SIMULAÇÕES DO EFEITO DO SOLVENTE NA ESTRUTURA PROTEICA

Acesse o link: https://www.labxchange.org/library/items/lb:LabXchange:ad1abe9f:lx_simulation:1

- a) Clicar em iniciar a simulação, “generate a random protein, water” e aperte o botão do “play”. A proteína começa a mexer e se reorganizar. Aperte o “pause” depois de alguns segundos e descreva os tipos de aminoácidos (polaridade) observados no interior e no exterior da proteína. Explique
- b) Agora com o mesmo modelo, modifique o solvente para “oil”. Aguarde a reorganização da proteína e aperte o pause depois. Descreva os tipos de aminoácidos (polaridade) observados no interior e no exterior da proteína. Explique.
- c) Escolha “all hydrophobic” em “oil” e aperte o “play”. Explique os resultados.
- d) Escolha “all hydrophobic” em “water” e aperte o “play”. Explique os resultados.
- e) Escolha “all hydrophilic” em “oil” e aperte o “play”. Explique os resultados.
- f) Escolha “all hydrophilic” em “water” e aperte o “play”. Explique os resultados.

6) SIMULAÇÕES DO EFEITO DA TEMPERATURA NA ESTRUTURA PROTEICA

Acesse o link: https://www.labxchange.org/library/items/lb:LabXchange:4dff76f7:lx_simulation:1

Antes de iniciar a simulação, clique “Reset”. Fotografe o que é observado antes de iniciar o experimento e a cada atividade.

- a) Aumente lentamente a temperatura e observe o que acontece até atingir a temperatura máxima. Qual o tipo de ligação mantida mesmo com o aquecimento da proteína?
- b) Diminua a temperatura lentamente e observe o resultado. Explique.
- c) Diminua a temperatura bruscamente e observe o resultado. Explique.
- d) Com o resfriamento, quais ligações são restabelecidas? A organização inicial é recuperada? Explique.