

Classe : 1 ^{ère} STL	Enseignement : Chimie-biochimie-sciences du vivant
-------------------------------	--

THEME du programme : 1- les systèmes vivants présentant une organisation particulière de la matière	Sous-thème : Les molécules des organismes vivants présentent des structures et des propriétés spécifiques
--	--

Relation entre les propriétés géométriques de la liaison peptidique et ses contraintes aux structures primaires et secondaires

Extrait du BOEN

CONNAISSANCES	CAPACITES
<p>La séquence d'acides aminés, à l'origine de la structure primaire, conditionne le repliement des protéines dans l'espace.</p> <p>Le repliement dans l'espace constitue la structure tridimensionnelle ou structure native de la protéine.</p> <p>Ce repliement est stabilisé par des interactions non covalentes (électrostatiques, hydrogène) et des ponts disulfure qui conditionnent les structures secondaires, tertiaire et quaternaire.</p>	<p>Utiliser des banques de données numériques et/ou des logiciels de modélisation moléculaire de protéines et expérimenter pour :</p> <ul style="list-style-type: none"> • mettre en relation les propriétés géométriques de la liaison peptidique et ses contraintes aux structures primaire et secondaire. • relier, sur un exemple, les propriétés des chaînes latérales des acides aminés à la structure tridimensionnelle.

Compétences transversales et attitudes

(Préambule des programmes et socle commun)

- Mobiliser ses connaissances
- Acquérir des données à l'aide d'un ordinateur
- Utiliser des banques de données
- Formuler des hypothèses
- Raisonner, argumenter, démontrer

Type de ressource

- Activité documentaire
- Banque de données, sitographie, bibliographie
- Réinvestissement et/ou approfondissement

Conditions de mise en œuvre, matériel requis :

- Une séance de 2 heures en effectif réduit
- Boîtes de modèles moléculaires et salle informatique équipée en logiciels de modélisation moléculaire (et dans ce cas, fichiers correspondants aux molécules à étudier)
- Formules semi développées des acides aminés (identifiants 3 lettres et 1 lettre)
- Représentations conventionnelles structures en hélice alpha et en brin bêta (modèle éclaté, ruban, cylindre/flèche)

Prérequis :

- Utilisation des modèles moléculaires conventionnels
- Utilisation d'un logiciel de modélisation moléculaire

Mots clés de recherche : liaison peptidique, plan amide, structure secondaire, squelette, interaction hydrogène, hélice alpha, brin bêta

Provenance : **académie de Grenoble**

Adresse du site académique : http://www.ac-grenoble.fr/accueil_peda/accueil.php

Exemples d'activités :

1. Utiliser le modèle pour construire des liaisons peptidiques.
2. Mesurer la liaison C-N, comparer aux données (distance C-N dans le cas d'une liaison simple, distance C=N dans le cas d'une double liaison), conclure.
3. Repérer les carbones successifs, essayer d'expliquer pourquoi ils sont en configuration *trans*.
4. Utiliser ou construire une séquence d'acides aminés puis effectuer des mesures (dimensions, angles), localiser les interactions hydrogène sur une cette structure en hélice α , en feuillet β , en pelote statistique, comparer, conclure (variabilité des structures protéiques).
5. Étudier un petit coude : comment est-il stabilisé ? Quels acides aminés facilitent le repliement brusque du squelette ? Quel peut-être son rôle dans le compactage des protéines ?
6. Repérer les atomes coplanaires.

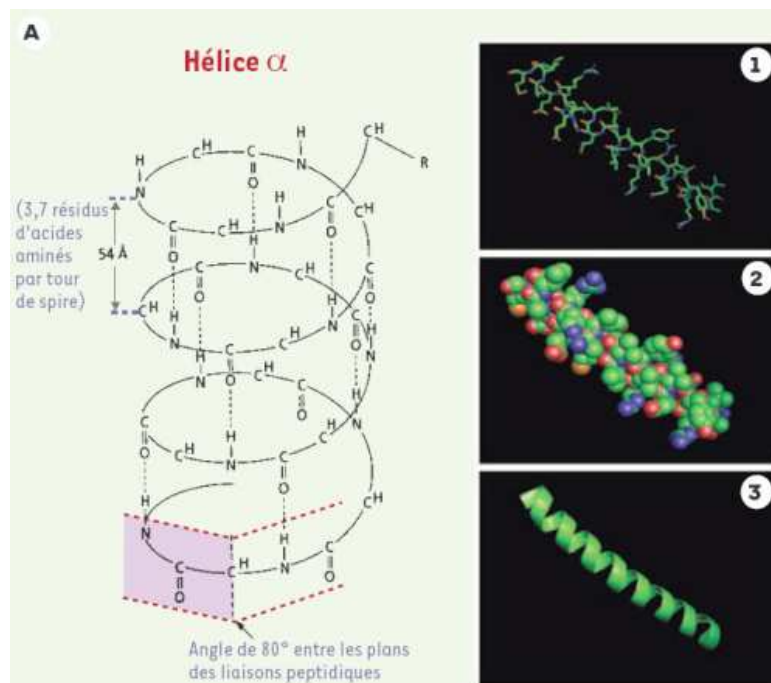


Fig. 1. : **Hélice α** (d'après MEDECINE/SCIENCES 2005 ; 21 : 601-7) - À gauche : représentation classique des atomes et des liaisons hydrogène (d'après JH. Weil *Biochimie générale*, 8^e ed. Paris : Masson, 1997). - À droite : 1. Représentation des liaisons covalentes, c'est-à-dire du squelette de résidus d'acides aminés et des chaînes latérales de l'hélice, dite « en bâtonnets ». 2. Représentation des nuages électroniques des atomes constituant l'hélice. 3. Représentation du squelette peptidique, dite schématique. Ces représentations ont été produites à l'aide du logiciel PyMOL.

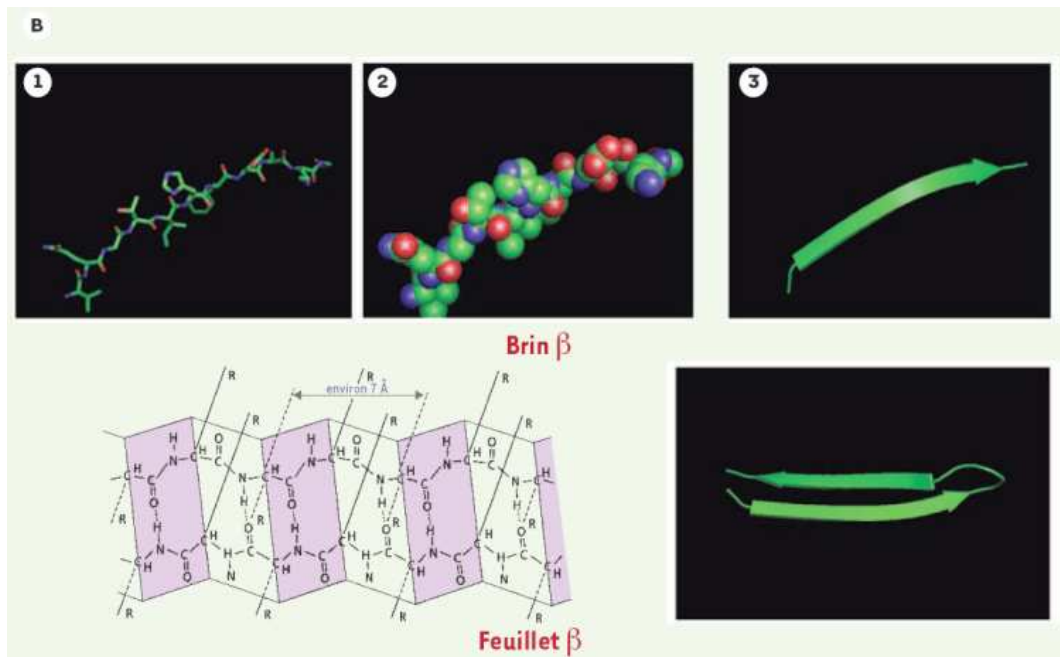


Fig. 2. : **Brin et feuillet β** (d'après MEDECINE/SCIENCES 2005 ; 21 : 601-7). En haut : brin β : 1. Représentation en bâtonnets. 2. Représentation volumétrique. 3. Représentation schématique. En bas, à gauche : représentation schématique d'un feuillet β (d'après JH. Weil *Biochimie générale*, 8^e ed. Paris : Masson, 1997) ; à droite : représentation schématique du feuillet β antiparallèle.

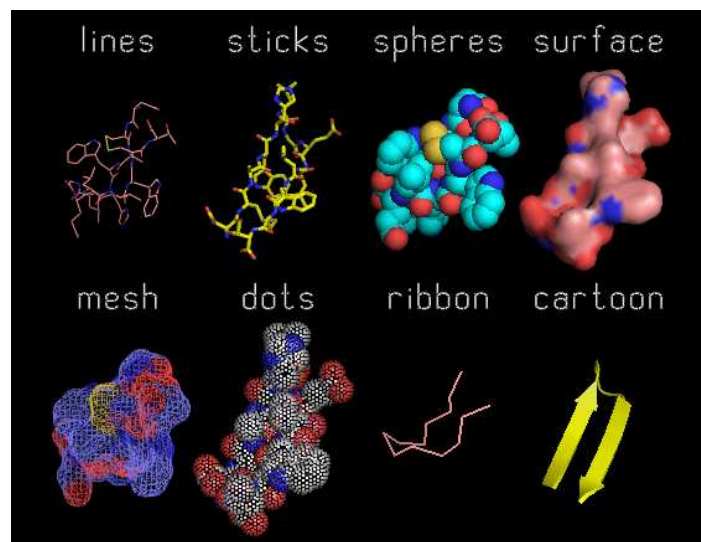


Fig. 3. : Différentes représentations des polypeptides (ici copie d'écran PyMOL)

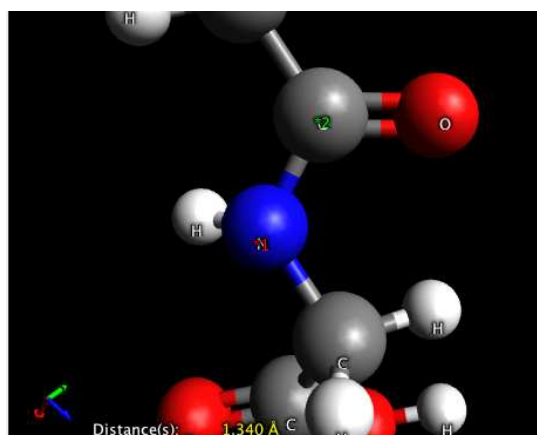


Fig. 4. : Affichage des noms d'éléments, mesure de distances interatomiques (copie écran Avogadro)

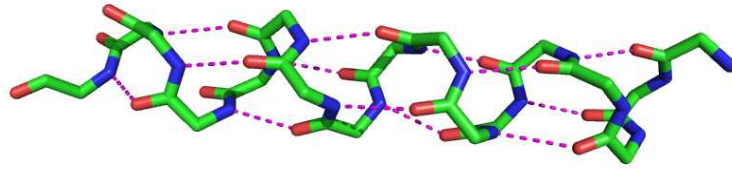


Fig. 5. : Structure secondaire, hélice et interactions hydrogène (copie écran PyMOL)

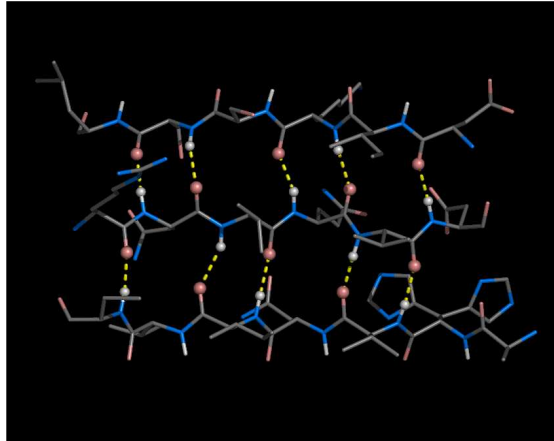
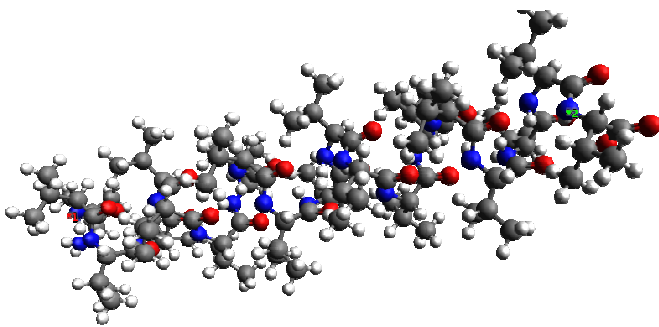
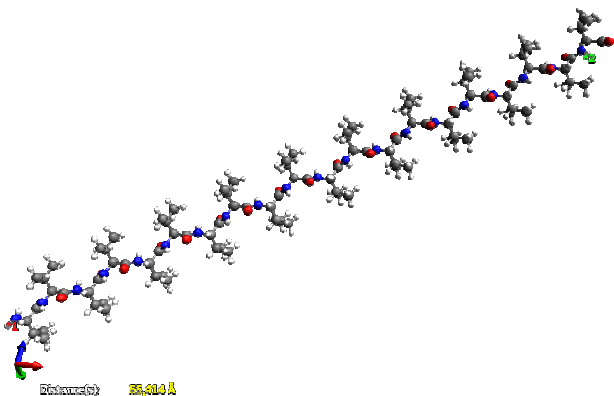


Fig. 6. : Structure secondaire, brins bêta antiparallèles + liaison hydrogène (copie écran PyMOL)



Distance: 29,276 Å

Fig. 7. : Construction puis mesure de la distance entre les N extrêmes d'une hélice alpha constituée de 20 valines (copie écran Avogadro)



Distance: 25,414 Å

Bibliographie :

Voir aussi le document : grenoble_première_CBSV_thème 1_Les molécules des organismes vivants

Notions de biochimie

D. Voet et J. G. Voet, *Biochemistry*. New York [etc.]: J. Wiley, 1995.

JH. Weil *Biochimie générale*, 8^e ed. Paris : Masson, 1997.

G. Durliat, *Biochimie structurale*. Paris: Diderot multimedia, 1998.

G. A. Petsko, D. Ringe, C. Sanlaville, et D. Charmot-Bensimon, *Structure et fonction des protéines*. De Boeck Université, 2008.

Sitographie :

Voir aussi le document : grenoble_première_CBSV_thème 1_Les molécules des organismes vivants

Visualiser et manipuler des molécules 3D

Avogadro (Licence GNU/GPL, Multiplateforme, gratuit)

http://avogadro.openmolecules.net/wiki/Main_Page

<http://www.sialle.education.fr/fiche-detaillee-avogadro-289.php>

PyMOL (Licence Python, Multiplateforme, Code source et anciennes versions gratuites, Derniers binaires gratuits pour un usage académique uniquement: enregistrement obligatoire)

<http://www.pymol.org/>

<http://www.embl.de/~seqanal/courses/proteinEvolutionEllsEmblSept2009/introToProteinStructureAndFunction.html>

http://www.chem.ucsb.edu/~molvisual/prot_struct.html

Jmol (licence GNU/LGPL, Multiplateforme, gratuit)

Intérêt particulier : utilisable en ligne sous forme de *plugin*.

<http://jmol.sourceforge.net>

De la structure primaire à la structure quaternaire :

Résumé – en schémas animés – de la structure primaire à la structure quaternaire

<http://www.milligan.edu/science/RDLura/BiochemWebsite/protein/structure/structure.swf>

Structure secondaire des polypeptides : représentation classique de l'hélice α et du brin β (d'après MEDECINE/SCIENCES 2005 ; 21 : 601-7)