

Estructura de Lípidos

Noviembre de 2007

Introducción

Si los Glúcidos son los principios inmediatos con mayor complejidad estructural, los lípidos son sin lugar a dudas, los principios inmediatos con mayor variedad de estructuras. Esto se debe a que el criterio de clasificación es la insolubilidad en agua y no una estructura química característica, como en los otros principios inmediatos que estudiamos. Esta variedad estructural, condiciona una variedad funcional paralela, que incluye la reserva y generación de energía, actividad hormonal, vitaminas, sabores, aromas, funciones estructurales, etc. En un intento por cubrir la mayoría de las clases de lípidos, en esta sesión únicamente revisaremos aspectos fundamentales de ellos.

Para este ejercicio debes descargar el archivo **Moleculas05.zip**, que contiene los archivos de trabajo. Descomprime la carpeta **Moléculas05** en **Mis documentos**. También debes crear la carpeta de trabajo para guardar todas tus imágenes; al igual que en las sesiones anteriores, debes nombrarla con tus apellidos y después **Lípidos** (ejemplo: **Lara Rodríguez Lípidos**)

Ácidos Grasos

Los ácidos grasos son los componentes más abundantes de los lípidos. Ya estudiaste su propiedades ahora, intentaremos explicarlas a partir de su estructura. Abre el archivo **Moleculas05\C12.pdb**. Selecciona los átomos de Carbono y márcalos con números. ¿Cómo se llama este ácido? Busca en la tabla de ácidos grasos del material suplementario, su temperatura de fusión.

Abre los archivos **C14.pdb**, **C16.pdb**, **C18.pdb**, **C20.pdb**, **C22.pdb** y **C24.pdb**, trata de identificar el ácido que corresponde cada uno y busca en la tabla de ácidos grasos, sus temperaturas de fusión. ¿Existe alguna relación entre los cambios que se observa en la estructura y las temperaturas de fusión?

Cierra los archivos anteriores y abre los siguientes **C18.pdb**, **C18D1.pdb**, **C18D2.pdb** y **C18D3.pdb**. Observa la diferencia en la forma que se produce por la presencia de dobles enlaces. Identifica los nombres de cada uno de los ácidos y busca su punto de fusión en la tabla de ácidos grasos. ¿Hay alguna de las propiedades medible de las estructuras, que se pueda relacionar con el punto de fusión? ¿Qué tipo de relación es?

Abre el archivo **C20D4.pdb**. Identifica el ácido de que se trata y busca su punto de fusión en la tabla. Para esta molécula, mide la propiedad que encuentres en los anteriores. ¿Este ácido, sigue la misma tendencia que el grupo anterior?

Alcoholes

Cierra los archivos anteriores y abre el archivo **sphingos.pdb** de la carpeta **Moleculas05** que contiene la molécula de Esfingosina. Selecciona los átomos de Carbono y márcalos con sus números. Observa como la Esfingosina tiene un extremo hidrófilo y otro hidrófobo, por lo cual ya es una molécula anfipática. ¿Qué números tienen los carbonos quirales de la Esfingosina? Usando el método que aprendiste en el ejercicio de Glúcidos, determina la configuración absoluta de los carbonos quirales de la Esfingosina.

na. Cierra el `sphingos.pdb` y abre `cetol.pdb`. Este archivo contiene las coordenadas de la estructura del alcohol cetílico, el componente principal de la cera de esperma de ballena. Además de la Esfingosina, en los lípidos también se encuentran otros alcoholes como Glicerol y Colesterol, el primero ya lo conoces y el segundo lo verás más adelante.

Acilglicéridos

Los archivos `satfat.pdb` y `unsatfat.pdb` contienen ejemplos de triacilglicéridos, totalmente saturado el primero y con un ácido insaturado el segundo. Identifica los ácidos que forman la estructura de cada compuesto. Observa la gran diferencia en la forma que induce la presencia de un sólo enlace doble.

Fosfolípidos

En la carpeta **Moleculas05** también tiene archivos con las estructuras de algunos fosfolípidos. Abre los archivos e identifica los lípidos representados. Compara en especial la semejanza entre la fosfatidilcolina y la esfingomielina, a pesar de la diferencia en el alcohol.

Isoprenoides

Estas moléculas constituyen la categoría más variable de lípidos. Sus estructuras se consideran derivadas del alqueno Isopreno. Abre el archivo `isopreno.pdb` de la carpeta **Moleculas05** y visualiza la molécula en modo **Ball and Stick**. Usando el ratón, aleja la molécula poco a poco hasta que se hagan visibles los dos enlaces dobles. Selecciona los carbonos y márcalos con su número. La imagen debe ser semejante a la Figura 1. Mide las distancias de enlace C_1-C_2 , C_2-C_3 , C_3-C_4 y C_2-C_5 . ¿Puedes explicar por qué los enlaces C_2-C_3 y C_2-C_5 tienen longitud diferente, si ambos son enlaces sencillos?

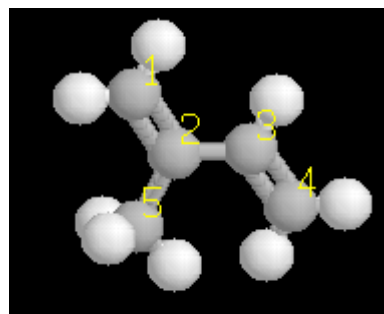


Figura 1. Isopreno

Cuando se polimeriza el isopreno se forman los terpenos que tienen funciones variadas. Cierra el archivo actual y abre el `limoneno.pdb` de la misma carpeta. Este es un monoterpene (con 10 átomos de carbono) cíclico. En ventanas diferentes abre los archivos `camphor.pdb` y `menthol.pdb`. Estos también son monoterpenos cíclicos. Observa la gran variación de estructuras que se obtiene con tan sólo 10 átomos de carbono. Si también consideramos los monoterpenos lineales (`citral.pdb` y `geraniol.pdb`) la variabilidad estructural se hace más notable. Como recordarás, estas moléculas se encuentran en los aceites esenciales de plantas.

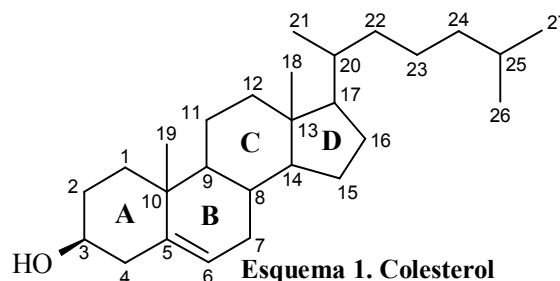
Los terpenos con número non de unidades de isopreno, reciben el nombre genérico de sesquiterpenos. Uno de los más importantes de estos es el retinol o vitamina A. Abre el archivo `vita.pdb` de la misma carpeta. Selecciona los átomos pesados (**select not hydrogen**) y márcalos con su número. En el proceso de visión, cuando la vitamina A absorbe la energía de un fotón, cambia la conformación *toda-trans*, como la de este archivo, a *11-cis*. En otra ventana de RasMol abre el archivo `c11retin.pdb` que contiene la molécula del *11-cis*-retinal, márcala en la misma forma que la anterior y compara la forma de ambas. El cambio conformacional sirve para almacenar la información de que se

ha absorbido un fotón; cuando la molécula vuelve a la conformación toda-*trans*, más estable, una proteína transdutora se encarga de disparar el impulso nervioso que será interpretado en la corteza visual.

Otros terpenos mayores también tienen funciones importantes como la vitamina E (**vitk.pdb**) que es un diterpeno y participa en la estabilización de las lipoproteínas, la vitamina K (**vitk.pdb**) necesaria para la coagulación y el escualeno (**squalene.pdb**) precursor del colesterol, que son triterpenos y la Coenzima Q (**Coq10.pdb**) un hexaterpeno que participa en la cadena respiratoria. Abre los archivos correspondientes para que conozcas la estructura tridimensional de estas moléculas.

Esteroides

Sin duda alguna los isoprenoides más interesantes son los esteroides debido a sus funciones biológicas. Todos los esteroides del organismo humano se sintetizan a partir del Colesterol. Abre el archivo **cholest.pdb** que está en la carpeta **Moléculas05**. Para simplificar la representación, elimina los átomos de Hidrógeno y visualiza la molécula en modo **Ball & Stick**.



Observa que los anillos fusionados del Fenantreno forman un plano con dos lados, el lado donde están los metilos se designa como alfa y en la representación plana del Esquema 1 se considera que se orienta hacia el observador, el otro se llama beta. Compara la fórmula del Esquemas 1 con la estructura tridimensional; intenta reconocer los grupos equivalentes de ambas representaciones. Mide el ángulo diedro equivalente al 4 – 5 – 10 – 9 del Esquema 1.

Existe un gran número de derivados del colesterol, aquí estudiaremos sólo unos cuantos ejemplos.

Ácido cólico. Este ácido biliar es un producto de degradación del colesterol con sólo 24 átomos de carbono. Componente de la bilis en forma de ácido como la sal que se forma al reaccionar con los aminoácidos Taurina ó Glicina, Abre el archivo **colico.pdb** y preséntalo igual que el Colesterol. Observa que la forma no cambia mucho, pero los tres grupos hidroxilo del lado beta, cooperan al carácter anfipático de la molécula. Para confirmar que la forma no cambia mucho, mide el ángulo diedro equivalente al 4 – 5 – 10 – 9 del Esquema 1.

Cortisol. Este compuesto es una de las hormonas de la corteza suprarrenal, importante en el metabolismo de glúcidos. Además de la disminución de carbonos a 21, el cambio de posición del doble enlace, modifica en forma marcada la forma del plano; para cuantificar el cambio, mide el ángulo diedro equivalente al 4 – 5 – 10 – 9 del Esquema 1. Este efecto se repite en la el mineralocorticoide **Aldosterona (aldosterona.pdb)**. Abre el archivo y mide el mismo ángulo. ¿Sí la forma es semejante, qué parte de estas moléculas es responsable de su acción diferente?

Progesterona. Esta hormona responsable del mantenimiento de la gestación, al igual que los corticoides tiene 21 átomos de carbono y una forma semejante, pero los sustituyentes son distintos. Abre el archivo **progesterona.pdb**, y observa las diferencias con

los corticoides. Como es de esperarse por la semejanza, la Progesterona conserva algo de actividad tipo corticoide.

Testosterona. Con 19 átomos de carbono, la Testosterona es el arquetipo de las hormona masculinas. Abre el archivo **testosterona.pdb**. Observa que debido a la posición el doble enlace del anillo A, el plano de fenantreno conserva la forma general de los corticoides, no es entonces raro que los esteroides anabolizantes derivados de estos, además de afectar el anabolismo y afectar el equilibrio electrolítico, tengan efectos masculinizantes. Para cuantificar la semejanza, mide el ángulo diedro equivalente al 4 – 5 – 10 – 9 del Esquema 1 y compáralo con el del Cortisol, Aldosterona y Progesterona.

Estradiol. Es la hormona femenina típica. Abre el archivo **estradiol.pdb**, como puedes ver la forma del plano del fenantreno es totalmente diferente al resto de las hormonas esteroides, debido a que ciclo A, es aromático. Mide el ángulo diedro equivalente al 4 – 5 – 10 – 9 del Esquema 1 y compáralo con las otras hormonas.

Membranas

La descripción actualmente aceptada de la estructura de las membranas biológicas es el modelo del Mosaico Fluido. Según este modelo, la bicapa de lípidos de la membrana se encuentra en un estado fluido. En los archivos **crystall.pdb**, **gel.pdb** y **fluid.pdb**, de la carpeta **Moléculas05**, contiene tres estados de la bicapa, sólido, gel y fluido. Abre los tres simultáneamente para que puedas observar las diferencias en estructura. Para eliminar las moléculas de agua selecciónalas (**select HOH**) y cambia el **Display** a **Backbone**. ¿En que parte del modelo está la diferencia más importante entre los tres estados? ¿Qué lípido se usó en el modelado de la membrana?

Ahora abre el archivo **Lípidos.doc** que está en la carpeta **Moléculas05** y resuélvelo; al terminar guárdalo en la carpeta de trabajo con tus imágenes y comprime la carpeta. Envía el archivo comprimido, adjunto a un correo electrónico dirigido a:

bioquimica_esm@yahoo.com.mx

El mensaje debe tener como asunto **Ácidos Nucleicos**, e incluir el **nombre** y **grupo** de quien lo envía, y el nombre y contenido del archivo adjunto.