



Universitat Rovira i Virgili

Departament de Bioquímica i Biotecnologia

9. ESTRUCTURA SECUNDÀRIA DEL DNA



ESTRUCTURA I FUNCIO DE
BIOMOLÈCULES

(Grau en Bioquímica i Biologia Molecular)
(Grau en Biotecnologia)



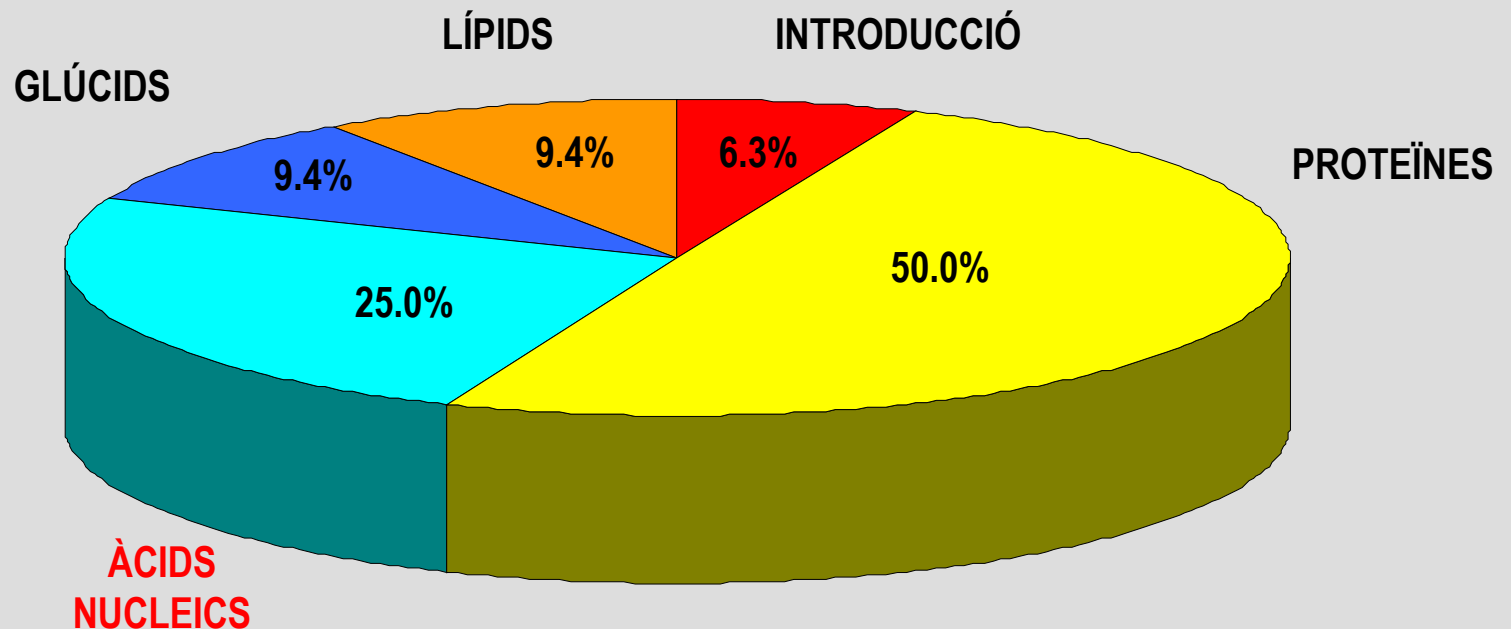
PROGRAMA DE TEORIA DE L'ASSIGNATURA

8) COMPONENTS ESTRUCTURALS DELS ÀCIDS NUCLEICS (2)

9) ESTRUCTURA SECUNDÀRIA DEL DNA (2)

10) ESTRUCTURA DELS PRINCIPALS TIPUS D'ARN (2)

11) FONAMENTS DE LA INTERACCIÓ PROTEÏNA-DNA (2)



OBJECTIUS PRINCIPALS DEL TEMA

- (1) correlacionar l'estructura de la doble hèlice del DNA com un factor decisiu en l'herència biològica
- (2) justificar a partir de les característiques químiques i estructurals, tant dels nucleòtids com de les cadenes polinucleotídiques, l'estructura de doble hèlice del DNA
- (3) reconèixer en l'estructura de la doble hèlice la presència de grups capaços de realitzar interaccions intermoleculars
- (4) conèixer la importància biològica de cada forma del DNA
- (5) comprendre l'efecte de la hidratació i dels cations sobre la forma del DNA i com es poden produir transicions entre formes distintes sense que es trenquin enllaços entre parells de bases
- (6) correlacionar la composició d'un DNA amb la seva temperatura de fusió

CONEIXEMENTS PREVIS

EL MODEL D'EN WATSON I CRICK



13. ESTRUCTURA SECUNDÀRIA DEL DNA



EL POLIMORFISME DEL DNA

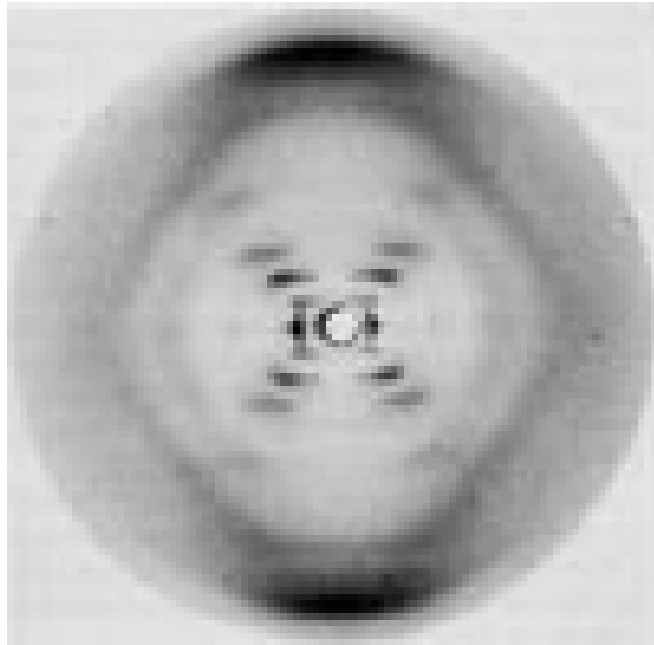
**DNA MONO-, TRI- I
TETRACATENARI**

LES REGLES DE CHARGAFF

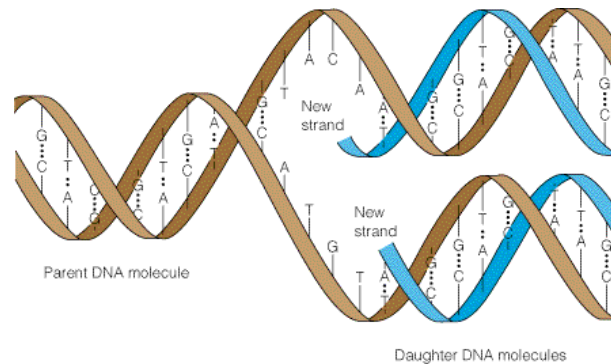
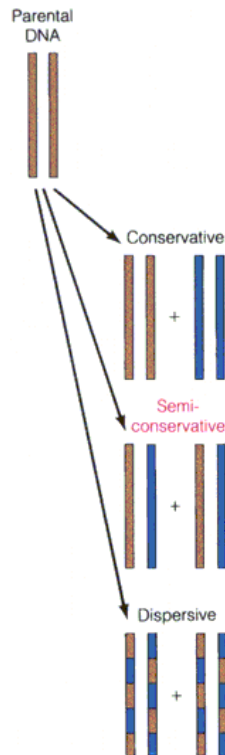
Source	Mol % of Bases			
	Adenine (A)	Guanine (G)	Cytosine ^a (C)	Thymine (T)
Bacteriophage ϕ X174	24.0	23.3	21.5	31.2
Bacteriophage T7	26.0	23.8	23.6	26.6
<i>Escherichia coli</i> B	23.8	26.8	26.3	23.1
<i>Neurospora</i>	23.0	27.1	26.6	23.3
Corn (maize)	26.8	22.8	23.2	27.2
<i>Tetrahymena</i>	35.4	14.5	14.7	35.4
Octopus	33.2	17.6	17.6	31.6
<i>Drosophila</i>	30.7	19.6	20.2	29.5
Starfish	29.8	20.7	20.7	28.8

CONCLUSIÓ: el nombre de mols d'**A** i de **T** (i de **G** i **C**) en un DNA **determinat** són iguals

ELS PATRONS DE DIFRACCIÓ OBTINGUTS PER EN MAURICE WILKINS I ROSALIND FRANKLIN



LA REPLICACIÓ DEL DNA SEGUEIX UN MECANISME SEMICONSERVATIU (MESELSON I STAHL, 1958)



CONEIXEMENTS PREVIS

EL MODEL D'EN WATSON I CRICK



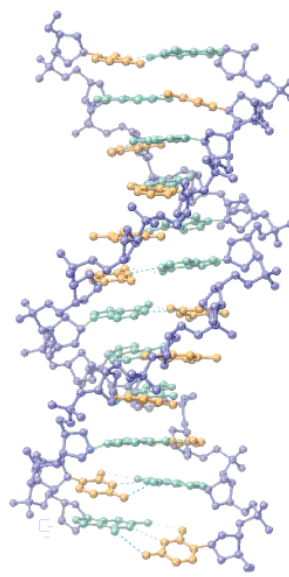
13. ESTRUCTURA SECUNDÀRIA DEL DNA



EL POLIMORFISME DEL DNA

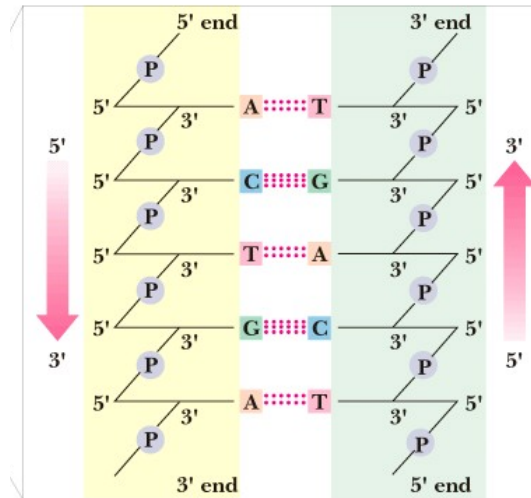
**DNA MONO-, TRI- I
TETRACATENARI**

EL MODEL DE DOBLE HÈLICE DEL DNA D'EN WATSON I CRICK

CARACTERÍSTIQUES	ESTRUCTURA
<u>Dues</u> cadenes polinucleotídiques <u>antiparal·leles</u> formant una doble hèlice dextrògira	
L'esquelet <u>sucres-fosfat</u> es troba en l'exterior de la doble hèlice	
Les <u>bases nitrogenades</u> queden en l'interior de la doble hèlice i sols són accessibles des de l'exterior pels <u>sols</u>	
Les 2 cadenes són <u>complementàries</u> (i.e. interaccionen mitjançant ponts d'hidrogen entre <u>A</u> i <u>T</u> i entre <u>G</u> i <u>C</u> de cadenes diferents)	
Aquest model <u>permet explicar</u> tant els resultats trobats per en <u>Chargaff</u> com explicar perquè la <u>replicació és semiconservativa</u>	

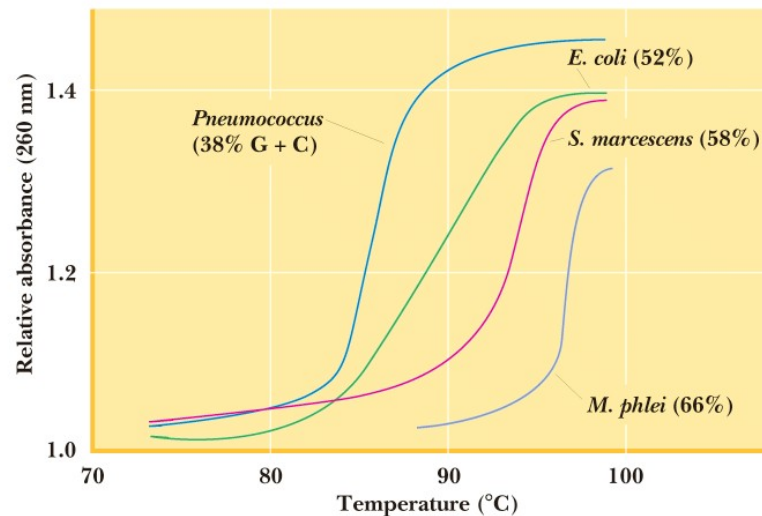
LA DIRECCIONALITAT DE LES CADENES EN EL MODEL D'EN WATSON I CRICK

LES CADENES COMPLEMENTÀRIES SÓN ANTIPARALLELES

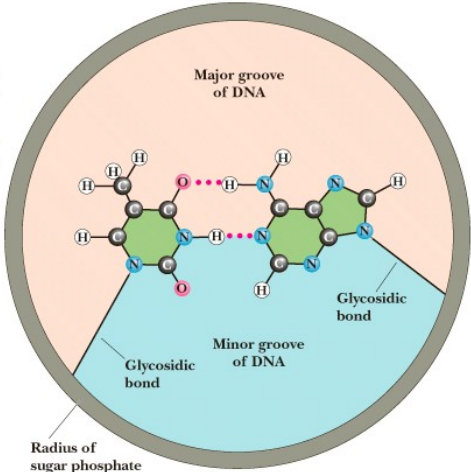
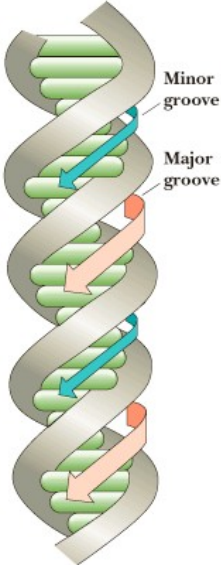


CONTINGUT EN G+C D'UN DNA I RESISTÈNCIA A LA DESNATURALITZACIÓ TÈRMICA

COM MAJOR ÉS EL **CONTINGUT EN G+C** MAJOR ÉS LA RESISTÈNCIA A LA **DESNATURALITZACIÓ TÈRMICA**



ELS SOLCS DE LA DOBLE HÈLICE EN EL MODEL D'EN WATSON I CRICK

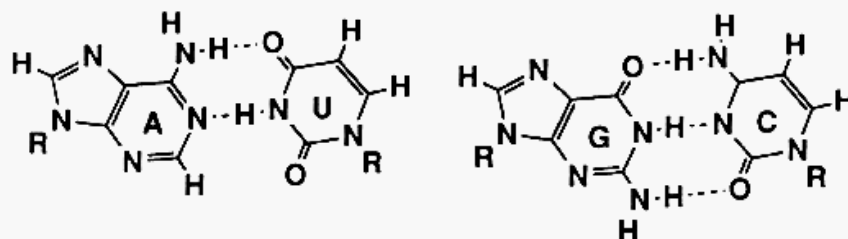
QUÈ ELS GENERA?	COM QUEDEN SITUATS EN LA DOBLE HÈLICE?
<p>Top view</p>  <p>The diagram shows a top-down view of two nitrogenous bases (green pentagons) connected by hydrogen bonds (pink dotted lines). The bases are situated within the sugar-phosphate backbone, represented by a grey circular ring. The space between the bases is divided into two regions: a large pink area labeled 'Major groove of DNA' and a smaller blue area labeled 'Minor groove of DNA'. Two 'Glycosidic bond' labels point to the connections between the bases and the backbone. A label 'Radius of sugar phosphate backbone' points to the outer edge of the grey ring.</p>	 <p>The diagram shows a 3D representation of a DNA double helix. The two strands are shown as grey ribbons twisting around each other. The nitrogenous bases are represented as green horizontal bars between the strands. The 'Major groove' is the deep, wide channel formed by the two strands, and the 'Minor groove' is the shallower, narrower channel. Arrows on the strands indicate the direction of the helix.</p>

PONTS D'HIDROGEN ENTRE PARELLS DE BASES EN EL MODEL D'EN WATSON I CRICK

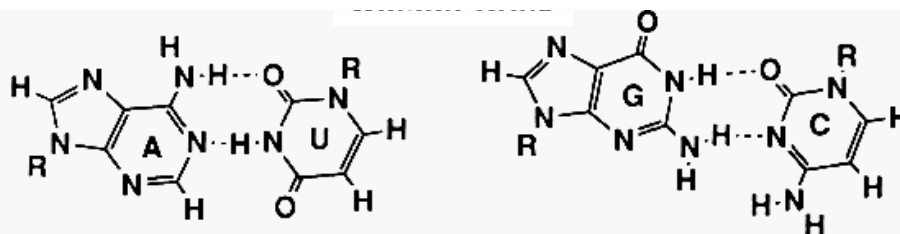
CARACTERÍSTIQUES	ESTRUCTURA
El nombre de ponts d'hidrogens és característic de cada parell de bases (2 per AT i 3 per GC)	<p>The diagram illustrates the hydrogen bonding between two base pairs in the Watson-Crick model. The top pair shows Thymine (a pyrimidine, pink) and Adenine (a purine, orange) connected by two hydrogen bonds. The bottom pair shows Cytosine (a pyrimidine, blue) and Guanine (a purine, green) connected by three hydrogen bonds. Each base is shown with its chemical structure, including carbon (black), nitrogen (blue), and oxygen (red) atoms. Hydrogen bonds are represented by dotted lines. Dimensions are indicated: for the Thymine-Adenine pair, the distance between the two bases is 1.11 nm, and the distance between the two hydrogen bonds is 0.28 nm and 0.30 nm. For the Cytosine-Guanine pair, the distance between the two bases is 1.08 nm, and the distance between the two hydrogen bonds is 0.29 nm and 0.30 nm. The bases are labeled 'To chain' and the angles are 50° and 51° for the top pair, and 52° and 54° for the bottom pair.</p>
Com <u>major</u> sigui el contingut en <u>GC</u> d'un DNA, <u>major</u> serà la <u>temperatura</u> a la qual es <u>desnaturalitzarà</u>	
Les <u>dimensions</u> de la doble hèlice són pràcticament <u>idèntiques</u> amb <u>independència</u> del parell de bases	
La formació dels ponts d'hidrogen entre bases complementàries <u>no esgota</u> les possibilitats de aquestes participin en <u>més interaccions</u> d'aquest tipus	

APARELLAMENTS ENTRE BASES DIFERENTS DELS ENUNCIATS EN EL MODEL D'EN WATSON I CRICK (1)

INTERACCIÓ CANÒNICA DE WATSON-CRICK

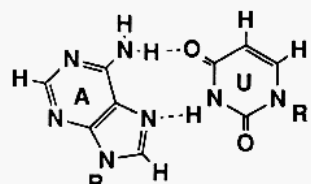


INTERACCIÓ DE WATSON-CRICK REVERSA



APARELLAMENTS ENTRE BASES DIFERENTS DELS ENUNCIATS EN EL MODEL D'EN WATSON I CRICK (2)

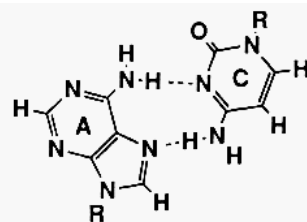
INTERACCIÓ DE TIPUS HOGGSTEEN



A-U Hoogsteen



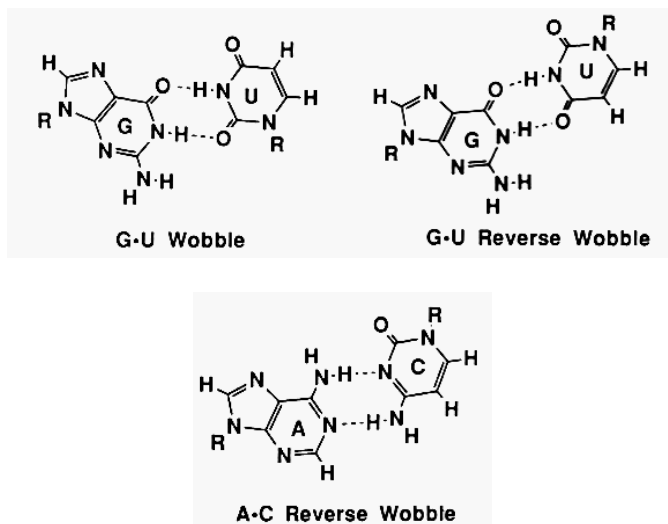
A-U Reverse Hoogsteen



A-C Reverse Hoogsteen

APARELLAMENTS ENTRE BASES DIFERENTS DELS ENUNCIATS EN EL MODEL D'EN WATSON I CRICK (3)

INTERACCIÓ DE TIPUS WOBBLE



INTERACCIONS NO COVALENTS QUE ESTABILITZEN A LA DOBLE HÈLICE

PONTS D'HIDROGEN

Entre els parells de bases complementàries (2 en el parell AT i 3 en el parell CG)

Dels àtoms polars de la cadena sucre-fosfat amb les molècules d'aigua de l'entorn

INTERACCIONS CÀRREGA-CÀRREGA

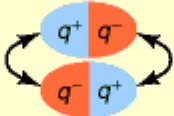
Les càrregues negatives dels grups fosfat amb els cations en solució com ara el Mg^{2+}

EFFECTE HIDROFÒBIC I INTERACCIONS DE VAN DER WAALS

Els parells de bases situades al nucli de l'hèlice es troben empaquetats

Això té una contribució molt important a l'energia global d'estabilització

FORCES DE DISPERSIÓ O DE VAN DER WAALS. DEPENDÈNCIA DE L'ENERGIA AMB LA DISTÀNCIA

Type of Interaction	Model
(f) Dispersion Involves mutual synchronization of fluctuating charges	

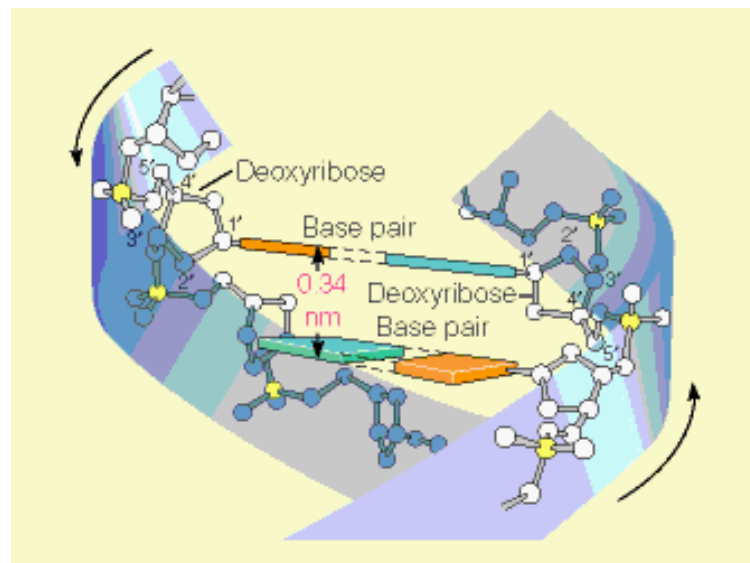
Example	Dependence of Energy on Distance
	$1/r^6$

PARÀMETRES EMPRATS EN LA DESCRIPCIÓ DE LA DOBLE HÈLICE D'ADN

PARÀMETRE	DESCRIPCIÓ
Sentit de gir de l'hèlice	Posició del nucleòtid en posició i+1 respecte al i
Nombre de nucleòtids per gir	Nombre de nucleòtids necessaris per fer un gir complet
Angle de gir per p.b. (°)	Angle que gira un parell de bases respecte al precedent
Desplaçament per p.b. (Å)	Desplaçament respecte a l'eix de la doble hèlice
Ascensió per p.b. (Å)	Desplaçament vertical d'un p.b. respecte al precedent
Inclinació per p.b. (°)	Inclinació d'un p.b. respecte al pla normal a l'eix de l'hèlice
Plegament del sucre	Conformació del sucre
Conformació enllaç glicosídic	Conformació de l'enllaç entre el sucre i la base nitrogenada

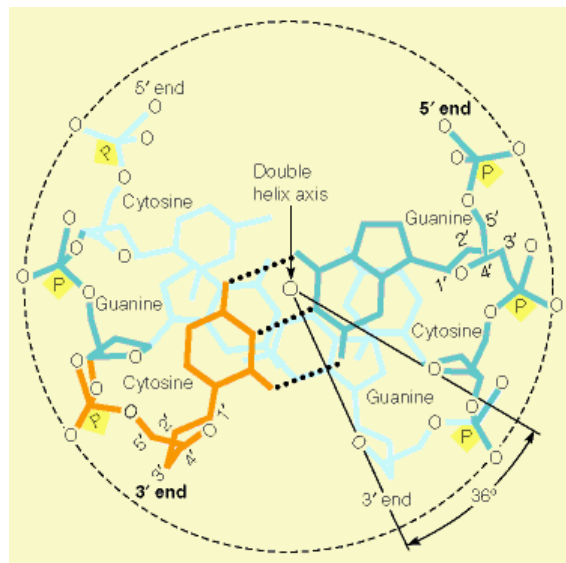
ASCENSIÓ PER CADA PARELL DE BASES

DESPLAÇAMENT VERTICAL D'UN P.B. RESPECTE AL PRECEDENT



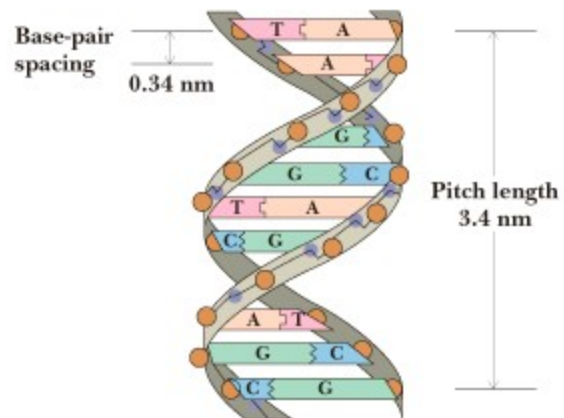
ANGLE DE GIR PER CADA PARELL DE BASES

ANGLE QUE GIRA UN P.B. RESPECTE AL PRECEDENT



PAS DE L'HÈLICE

PAS DE L'HÈLICE = ASCENSIÓ * NOMBRE DE P.B. PER GIR



CONEIXEMENTS PREVIS

EL MODEL D'EN WATSON I CRICK



13. ESTRUCTURA SECUNDÀRIA DEL DNA

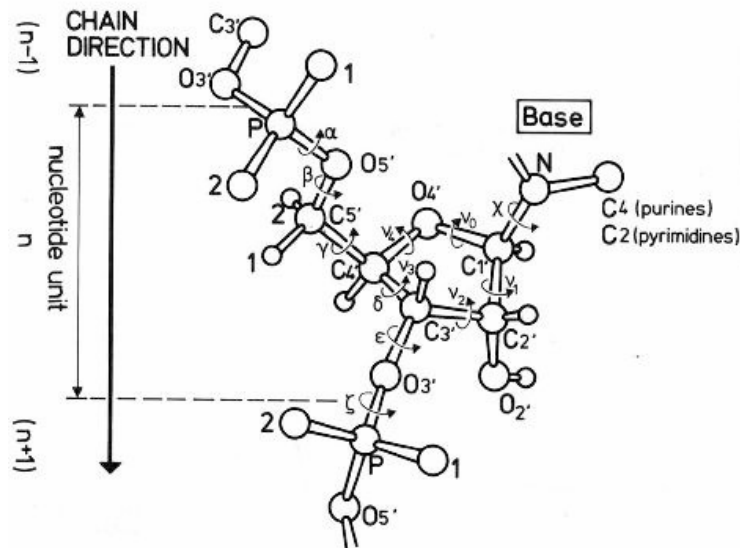


EL POLIMORFISME DEL DNA

**DNA MONO-, TRI- I
TETRACATENARI**

FONAMENTS ESTRUCTURALS DEL POLIMORFISME DEL DNA

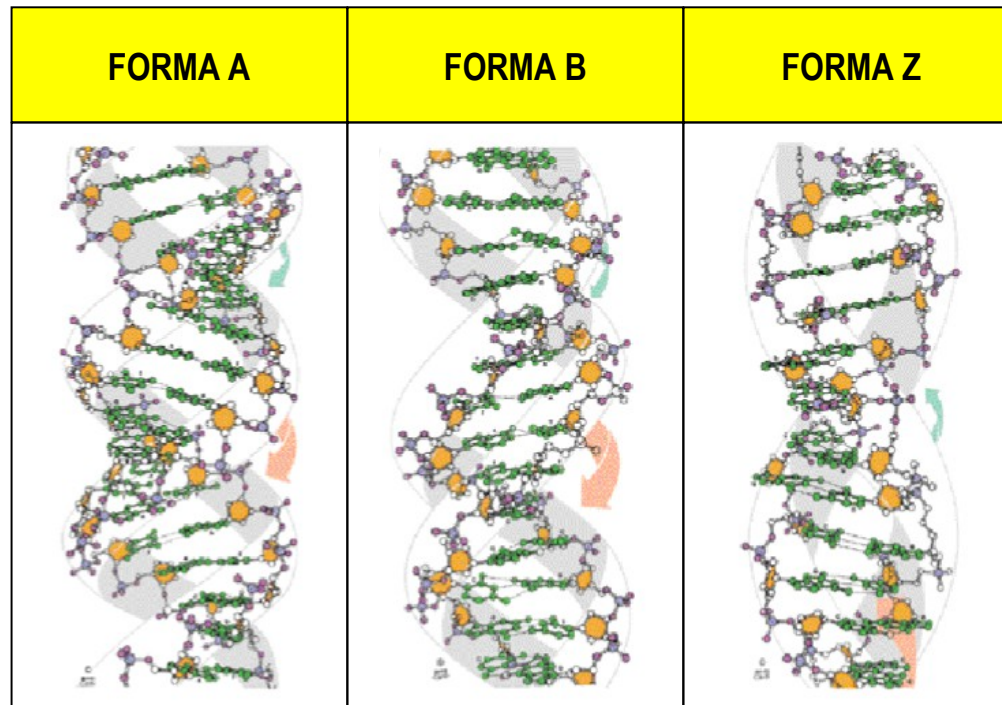
ADAPTACIÓ DE L'ESTRUCTURA DEL DNA A L'HUMITAT I ALS CONTRAIONS DEL MEDI



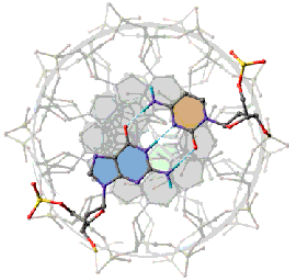
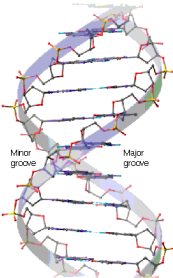
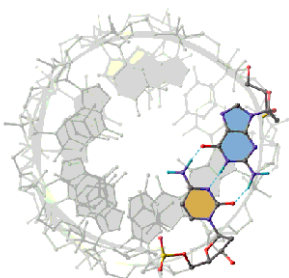
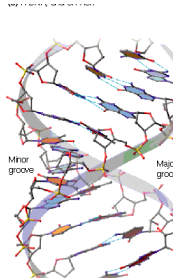
“FORMES” DEL DNA, SITUACIONS EN QUE ES PRODUEIXEN I DISPONIBILITAT BIOLÒGICA

FORMA	SEQÜÈNCIA CARACT.	GRAU D'HIDRATACIÓ	DISPONIBILITAT
B	Seqüències generals sense Gs seguides o Cs seguides o alternança de CG	elevat	Forma majoritària biològicament
A	Gs seguides o Cs seguides	Disminuir el grau d'hidratació respecte a B	En dúplex d'híbrids entre DNA i RNA (i en dúplex d'RNA)
Z	Alternança de CG	Disminuir el grau d'hidratació respecte a B	En situacions especials dins la cèl·lula

ESTRUCTURA DE LES FORMES DE DNA MÉS RELLEVANTS



CARACTERÍSTIQUES MÉS RELLEVANTS DE LES PRINCIPALS “FORMES” (1)

	VISIÓ PARAL·LELA A L'EIX	VISIÓ PERPENDICULAR A L'EIX
FORMA B		
FORMA A		

CARACTERÍSTIQUES MÉS RELLEVANTS DE LES PRINCIPALS “FORMES” (2)

Comparison of the Structural Properties of A-, B-, and Z-DNA

	Double Helix Type		
	A	B	Z
Overall proportions	Short and broad	Longer and thinner	Elongated and slim
Rise per base pair	2.3 Å	3.32 Å ± 0.19 Å	3.8 Å
Helix packing diameter	25.5 Å	23.7 Å	18.4 Å
Helix rotation sense	Right-handed	Right-handed	Left-handed
Base pairs per helix repeat	1	1	2
Base pairs per turn of helix	~11	~10	12
Mean rotation per base pair	33.6°	35.9° ± 4.2°	-60°/2
Pitch per turn of helix	24.6 Å	33.2 Å	45.6 Å
Base-pair tilt from the perpendicular	+19°	-1.2° ± 4.1°	-9°
Base-pair mean propeller twist	+18°	+16° ± 7°	~0°
Helix axis location	Major groove	Through base pairs	Minor groove
Major groove proportions	Extremely narrow but very deep	Wide and with intermediate depth	Flattened out on helix surface
Minor groove proportions	Very broad but shallow	Narrow and with intermediate depth	Extremely narrow but very deep
Glycosyl bond conformation	anti	anti	anti at C, syn at G

CARACTERÍSTIQUES MÉS RELLEVANTS DE LES PRINCIPALS “FORMES” (3)

CONFORMACIONS DELS SUCRES EN FUNCIÓ DE LA FORMA

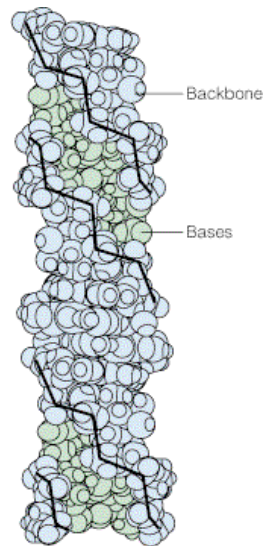
FORMA A: C3'-endo (conformació anti de l'enllaç β -N-glicosídic)

FORMA B: C2'-endo (conformació anti de l'enllaç β -N-glicosídic)

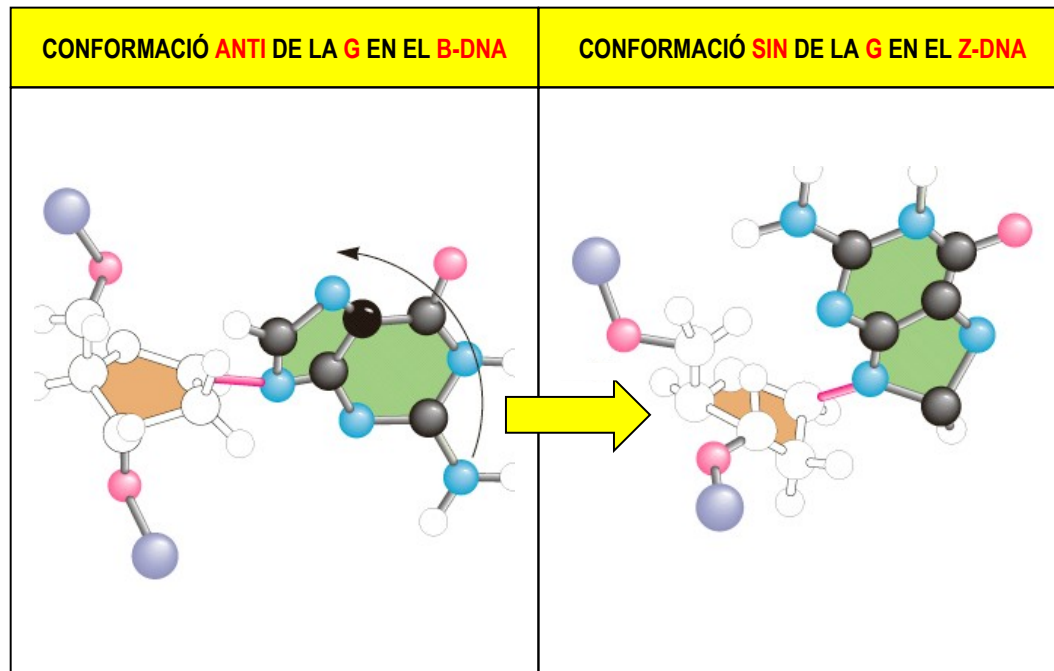
FORMA Z: C2'-endo (**C**; conf. anti) i C3'-endo (**G**; conf. syn)

CARACTERÍSTIQUES MÉS RELLEVANTS DE LES PRINCIPALS “FORMES” (4)

EL Z-DNA: PER QUÈ S'ANOMENA AIXÍ?

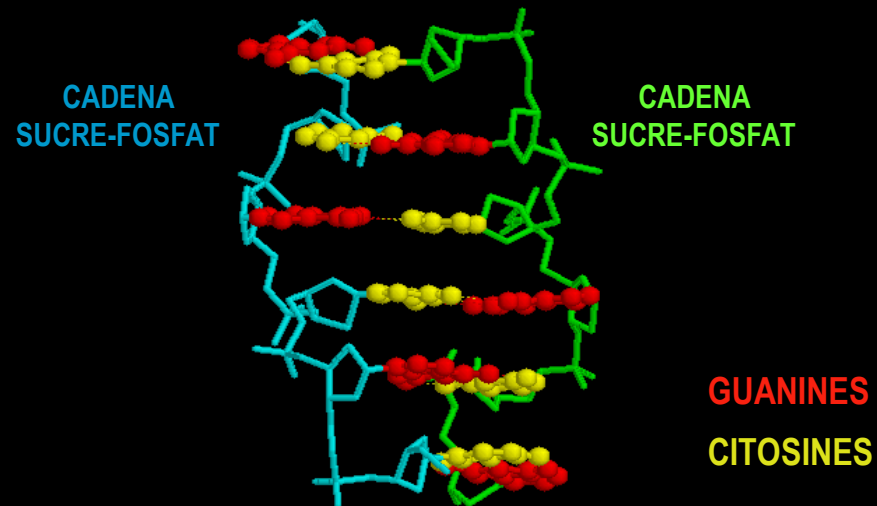


CARACTERÍSTIQUES MÉS RELLEVANTS DE LES PRINCIPALS “FORMES” (5)



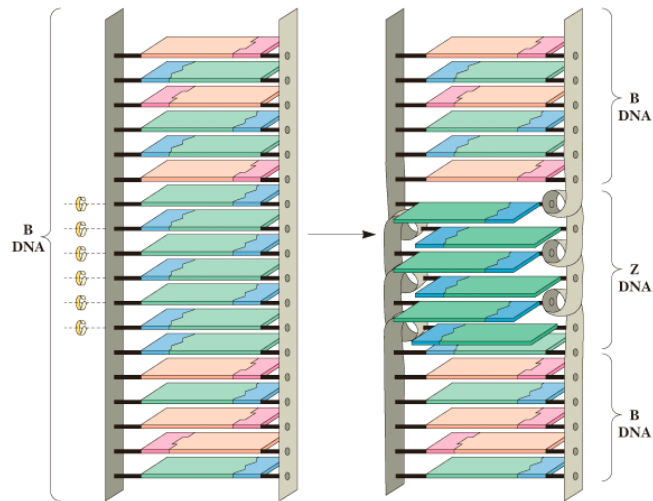
CARACTERÍSTIQUES MÉS RELLEVANTS DE LES PRINCIPALS “FORMES” (6)

EL Z-DNA: CONFORMACIÓ DELS SUCRES



TRANSICIÓ ENTRE “FORMES” DE DNA

TRANSICIÓ DE LA FORMA B A LA Z EN CONDICIONS AMBIENTALS FAVORABLES



CONEIXEMENTS PREVIS

EL MODEL D'EN WATSON I CRICK



13. ESTRUCTURA SECUNDÀRIA DEL DNA

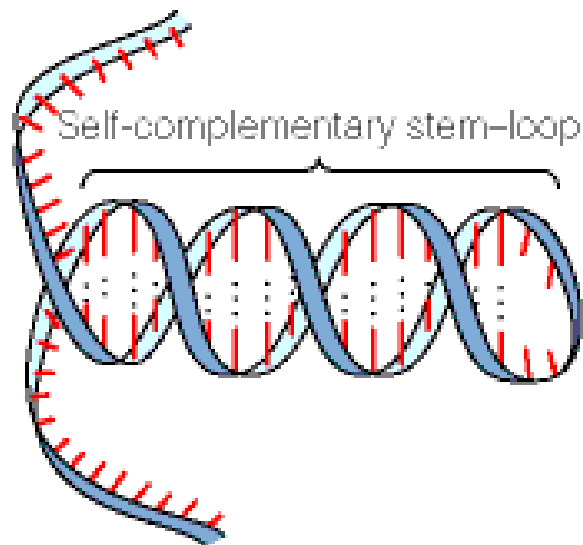


EL POLIMORFISME DEL DNA

**DNA MONO-, TRI- I
TETRACATENARI**

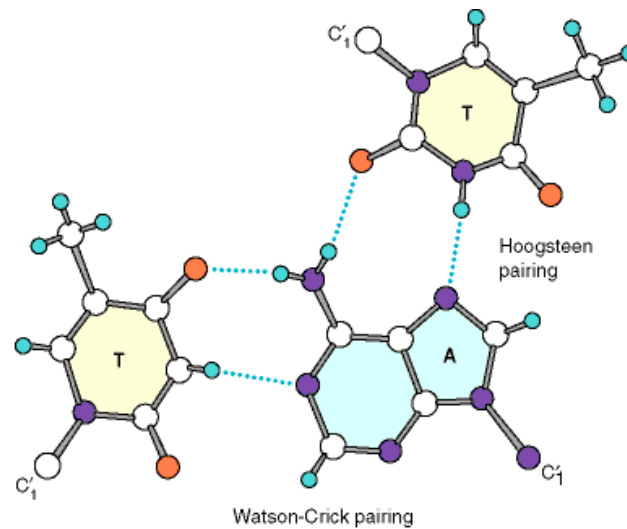
ZONES DE DOBLE HÈLICE EN UN DNA MONOCATENARI

ES FORMEN ZONES DE **DOBLE HÈLICE** EN AQUELLES ZONES ON
HI HA **COMPLEMENTARIETAT** ENTRE LES BASES



ESTRUCTURES DE DNA TRICATENÀRIES

INVOLUCREN PONTS D'HIDROGEN DE TIPUS **HOOGSTEEN**



OBJECTIUS PRINCIPALS DEL TEMA

- (1) correlacionar l'estructura de la doble hèlice del DNA com un factor decisiu en l'herència biològica
- (2) justificar a partir de les característiques químiques i estructurals, tant dels nucleòtids com de les cadenes polinucleotídiques, l'estructura de doble hèlice del DNA
- (3) reconèixer en l'estructura de la doble hèlice la presència de grups capaços de realitzar interaccions intermoleculars
- (4) conèixer la importància biològica de cada forma del DNA
- (5) comprendre l'efecte de la hidratació i dels cations sobre la forma del DNA i com es poden produir transicions entre formes distintes sense que es trenquin enllaços entre parells de bases
- (6) correlacionar la composició d'un DNA amb la seva temperatura de fusió