

Les Interactions et l'eau

support CM : Pr H. Becker
courriel : h.becker@unistra.fr

Institut de Physiologie et de Chimie Biologique

Plan

Généralités sur l'importances des liaisons/interactions et leur niveau d'énergie

I. La liaison covalente

1. Quels sont les atomes qu'on lie ou avec lesquels on interagit en biochimie?
2. Valence de C, H, O, N, P et liaison covalente
3. Les liaisons covalentes des molécules biologiques
4. Les groupements fonctionnels des molécules biologiques

II. Les interactions non covalentes en biochimie et l'implication de l'eau

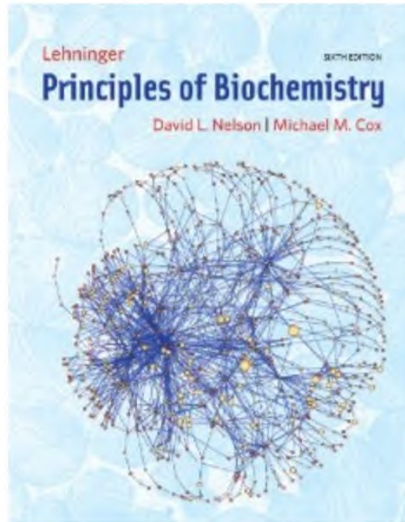
1. La force de van der Waals
2. Le Rayon de van der Waals (**RWD**)
3. La liaison ionique: une forme d'interaction électrostatique
4. L'eau: un dipôle électrique qui forment des liaisons hydrogène
5. Liaisons H en biologie: les groupements donneurs & accepteurs impliqués
6. Interaction hydrophobes: molécules polaire et de non polaires
7. L'eau liée est essentielle à la fonction des protéine/enzymes

Supports du cours

<http://www.ncbi.nlm.nih.gov/books/>

The screenshot shows the NCBI Bookshelf search interface. At the top, there are navigation links for 'NCBI Resources' and 'How To'. The search bar contains the text 'stryer biochemistry' and a 'Search' button. Below the search bar, there are links for 'Browse Titles', 'Save search', 'Limits', and 'Advanced'. The 'Display Settings' section shows 'Summary, 20 per page, Sorted by Relevance'. The 'Results: 16' section lists the first result: '1. Biochemistry, 5th edition. Berg JM, Tymoczko JL, Stryer L. New York: W H Freeman; 2002.' with links for 'Top results in this book' and 'Table of Contents'.

Lehninger



Biochimie Générale J-H Weil



<http://www.genome.jp/kegg/>

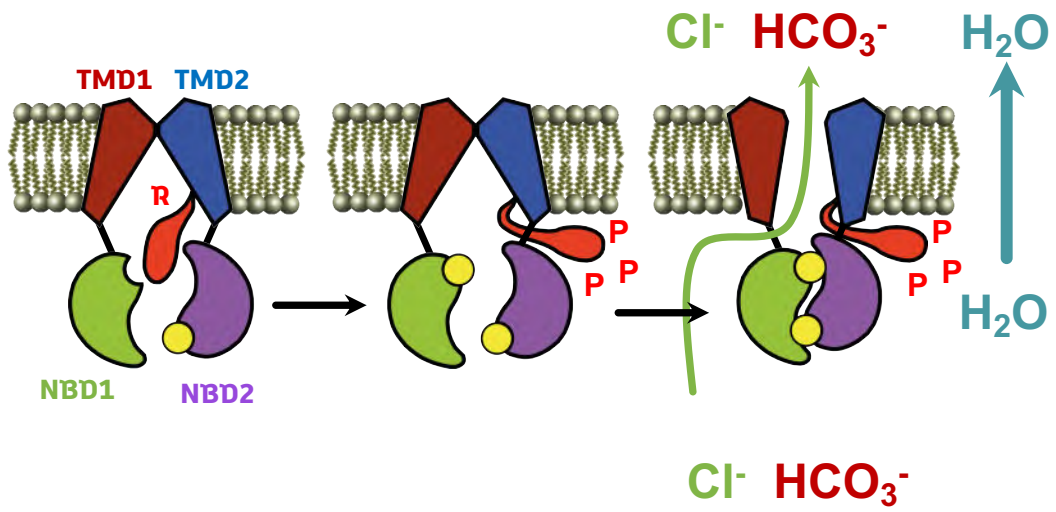
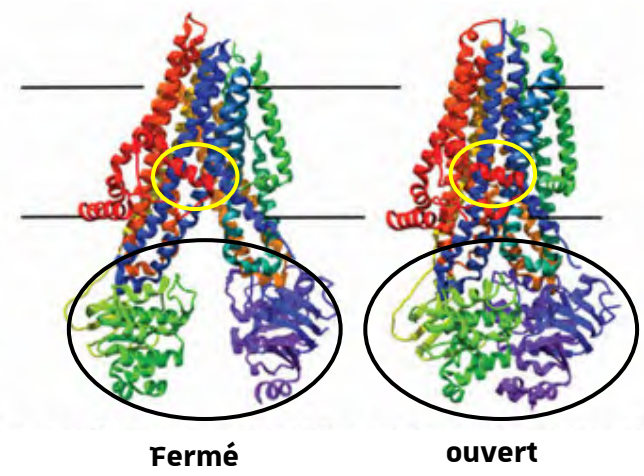
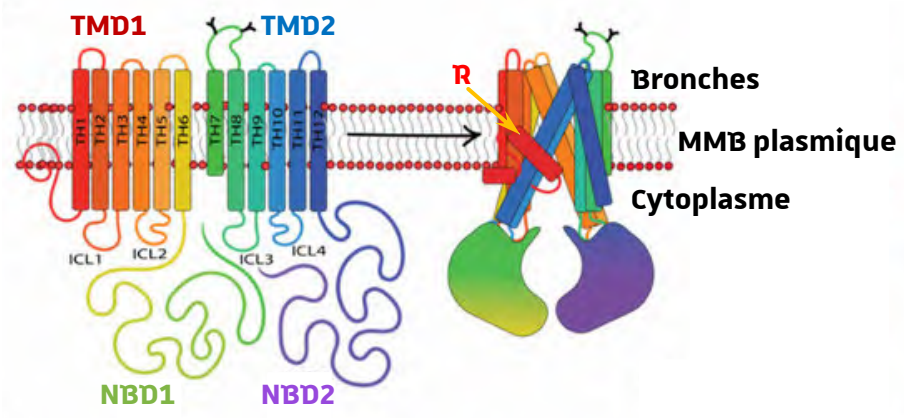
Généralités

1. Différents types de représentations des atomes & molécules
2. Noms et nomenclatures
3. Types d'interactions (liaisons)
4. Niveaux d'organization en biochimie
5. Synthèse et lyse de liaisons ... le lien avec H₂O

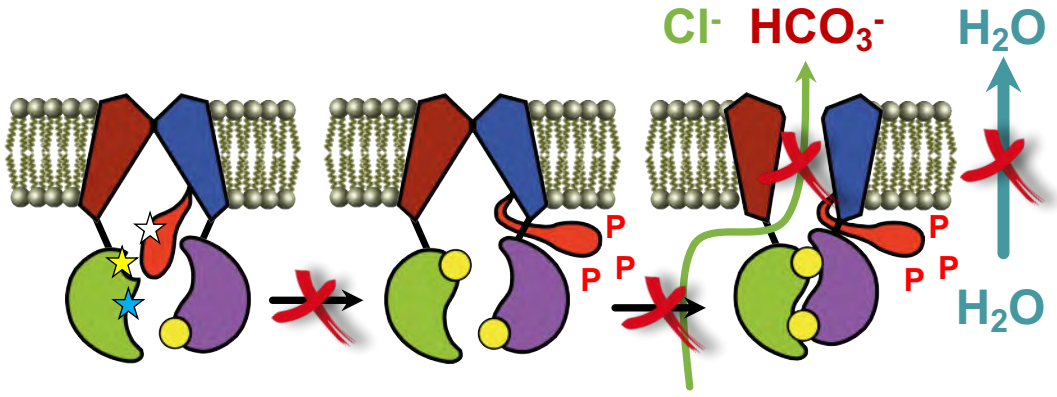
Pourquoi la notion d'interactions est-elle importante ?

La mucoviscidose, littéralement "maladie des mucus visqueux", également nommée fibrose kystique du pancréas (ou en anglais cystic fibrosis, CF), est la maladie génétique grave la plus fréquente dans les populations de type caucasienne (population blanche occidentale). On estime qu'une personne sur 25 serait porteuse de cette maladie, soit environ deux millions de porteurs sains. [https://laboratoire-recherche-brest.net/notre-mission-la-mucoviscidose-pxl-47_63.html]

CFTR: Cystic Fibrosis Transmembrane conductance Regulator

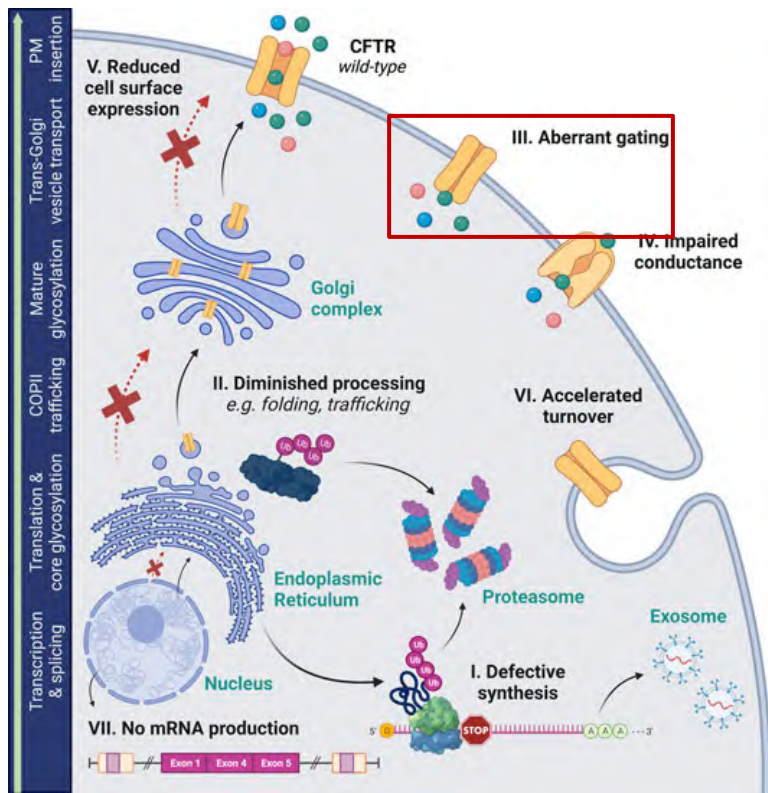
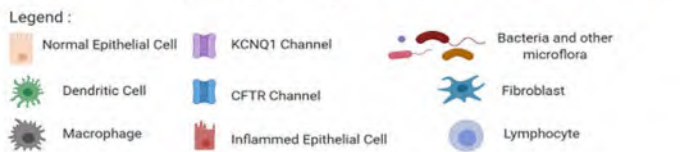
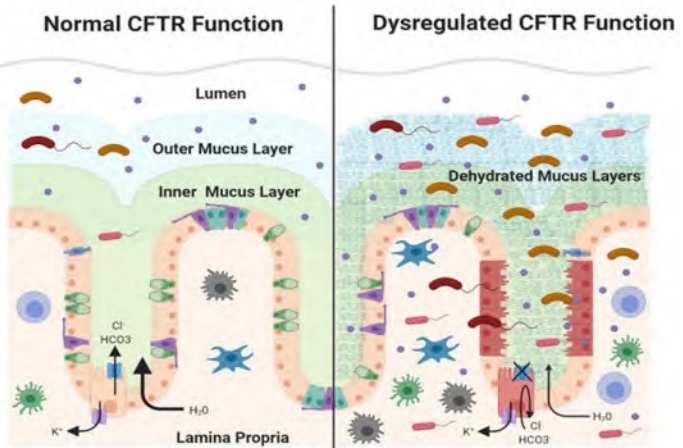


Pourquoi la notion d'interactions est-elle importante ?



Le canal ne s'ouvre plus si:

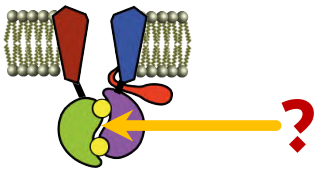
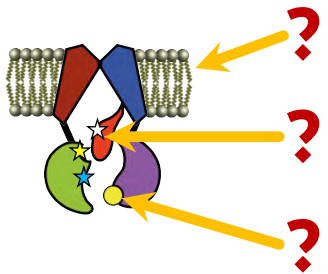
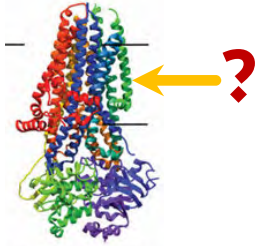
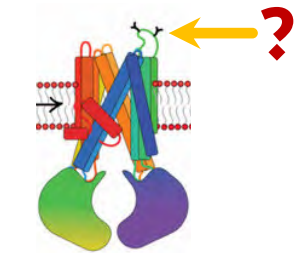
- ☆ Mutation d'un résidu empêchant la phosphorylation de R
- ★ Mutation d'un résidu empêchant la fixation ATP dans NBD1
- ★ Mutation d'un résidu empêchant interaction NBD1-NBD2



- Class I. Defective synthesis**
G542X, 3120+1G>A
- Class II. Diminished processing**
F508del, N1303K, A559T
- Class III. Aberrant gating**
G551D, S549N
- Class IV. Impaired conductance**
R117H, R334W, D1152H
- Class V. Reduced cell surface expression**
3849+10kbC>T, A455E
- Class VI. Accelerated turnover**
120del23
- Class VII. No mRNA production**
CFTRdele2,3

Pourquoi la notion d'interactions est-elle importante ?

Représentations et nom ?

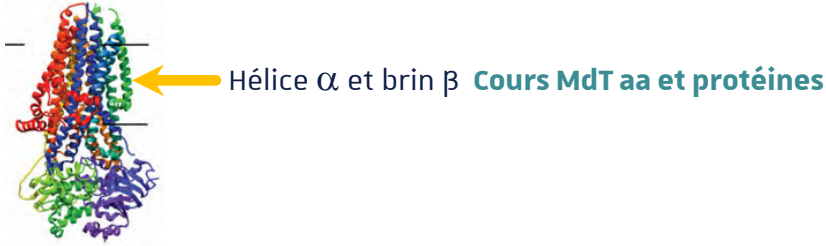


Pourquoi la notion d'interactions est-elle importante ?

Quand et où en parlera-t-on?



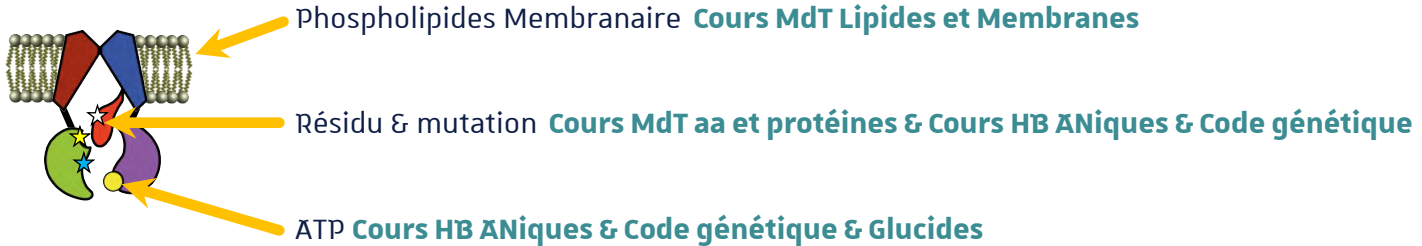
Glycosylée **Cours HB Glucides**



Hélice α et brin β **Cours MdT aa et protéines**



Gène – exon – intron **Cours HB Acides Nucléiques**



Phospholipides Membranaire **Cours MdT Lipides et Membranes**

Résidu & mutation **Cours MdT aa et protéines & Cours HB ANIques & Code génétique**

ATP **Cours HB ANIques & Code génétique & Glucides**



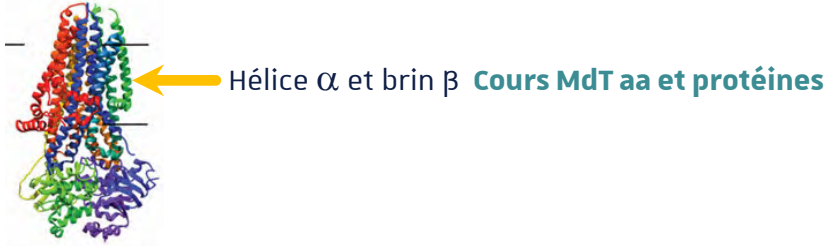
Interactions **Cours HB Interaction & H₂O et dans TOUS les autres cours**

Pourquoi la notion d'interactions est-elle importante ?

Des exemples ? Vos Connaissances à ce sujet ?



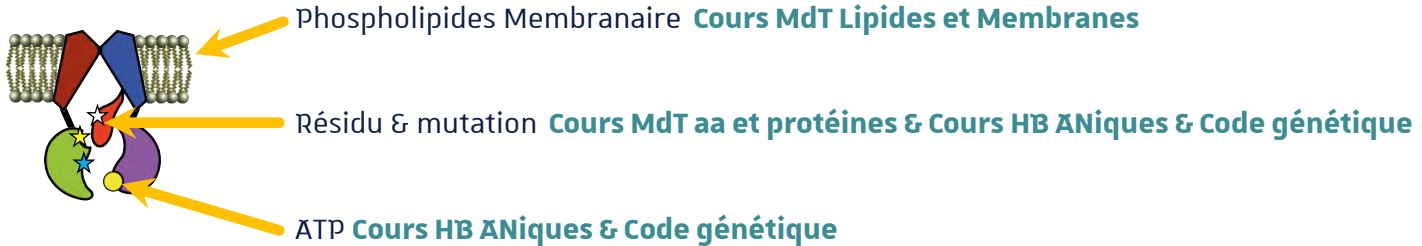
Glycosylée **Cours HB Glucides**



Hélice α et brin β **Cours MdT aa et protéines**



Gène – exon – intron **Cours HB Acides Nucléiques**



Phospholipides Membranaire **Cours MdT Lipides et Membranes**

Résidu & mutation **Cours MdT aa et protéines & Cours HB ANIques & Code génétique**

ATP **Cours HB ANIques & Code génétique**



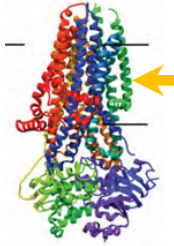
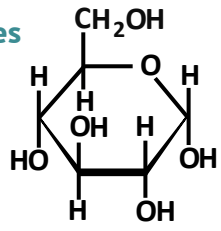
Interactions **Cours HB Interaction & H₂O**

Pourquoi la notion d'interactions est-elle importante ?

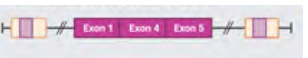
Des exemples ? Vos Connaissances à ce sujet ?



Glycosylée **Cours HB Glucides**



Hélice α et brin β **Cours MdT aa et protéines**



Gène - exon - intron **Cours HB Acides Nucléiques**

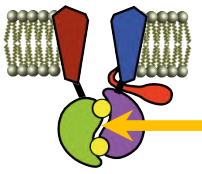


Phospholipides Membranaire **Cours MdT Lipides et Membranes**



Résidu & mutation **Cours MdT aa et protéines & Cours HB ANiques & Code génétique**


ATP **Cours HB ANiques & Code génétique**



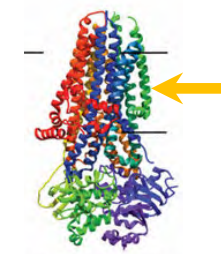
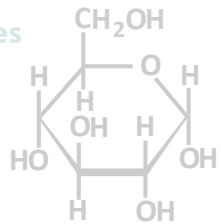
Interactions **Cours HB Interaction & H₂O**

Pourquoi la notion d'interactions est-elle importante ?

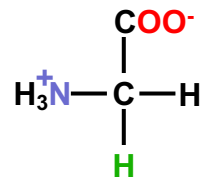
Des exemples ? Vos Connaissances à ce sujet ?



Glycosylée Cours HB Glucides



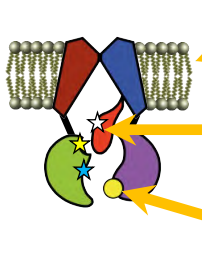
Hélice α et brin β Cours MdT aa et protéines



Class III.
Aberrant gating
G551D, S549N ?



Gène - exon - intron Cours HB Acides Nucléiques



Phospholipides Membranaire Cours MdT Lipides et Membranes

Résidu & mutation Cours MdT aa et protéines & Cours HB ANiques & Code génétique


ATP Cours HB ANiques & Code génétique



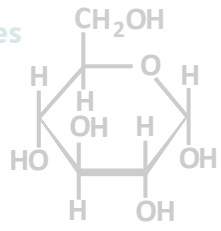
Interactions Cours HB Interaction & H₂O

Pourquoi la notion d'interactions est-elle importante ?

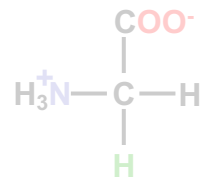
Des exemples ? Vos Connaissances à ce sujet ?



Glycosylée Cours HB Glucides



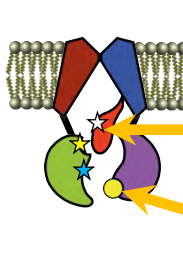
Hélice α et brin β Cours MdT aa et protéines



Class III. Aberrant gating G551D, S549N ?



Gène - exon - intron Cours HB Acides Nucléiques



Phospholipides Membranaire Cours MdT Lipides et Membranes

Résidu & mutation Cours MdT aa et protéines & Cours HB ANiques & Code génétique

ATP Cours HB ANiques & Code génétique


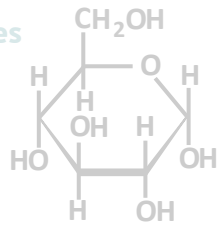


Interactions Cours HB Interaction & H₂O

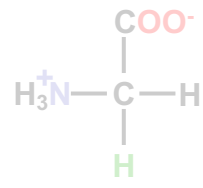
Pourquoi la notion d'interactions est-elle importante ?

Des exemples ? Vos Connaissances à ce sujet ?

Glycosylée Cours HB Glucides

Hélice α et brin β Cours MdT aa et protéines

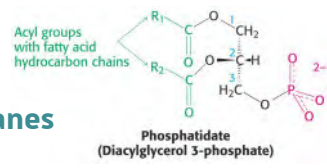



Class III. Aberrant gating G551D, S549N ?

Gène - exon - intron Cours HB Acides Nucléiques



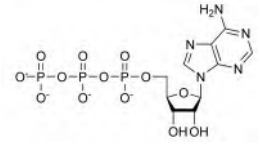
Phospholipides Membranaire Cours MdT Lipides et Membranes

Résidu & mutation Cours MdT aa et protéines & Cours HB ANIques & Code génétique



ATP Cours HB ANIques & Code génétique

		Deuxième lettre				
		U	C	A	G	
Première lettre	U	Phe	Ser	Tyr	Cys	U
	C	Leu	Ser	Stop	Stop	C
	A	Leu	Pro	His	Arg	A
	G	Leu	Pro	Gln	Arg	G
Troisième lettre	U	Leu	Ser	Stop	Trp	U
	C	Leu	Pro	His	Arg	C
	A	Ile	Thr	Asn	Ser	A
	G	Val	Ala	Asp	Gly	G

Interactions Cours HB Interaction & H₂O



Pourquoi la notion d'interactions est-elle importante ?

Des exemples ? Vos Connaissances à ce sujet ?

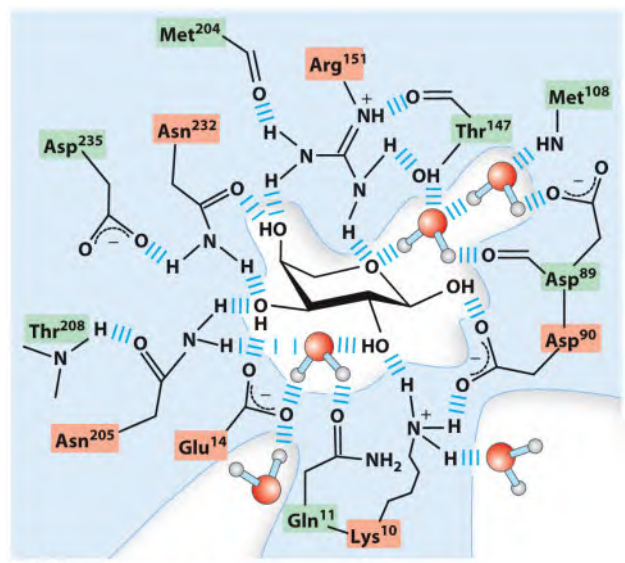
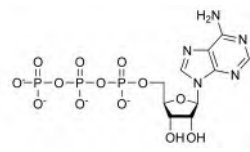
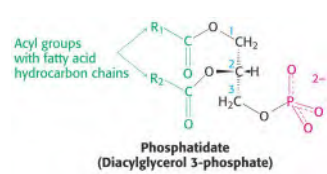
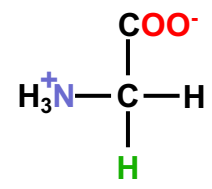
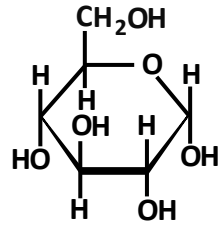
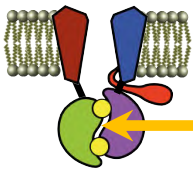


Figure 2-11
Lehninger Principles of Biochemistry, Seventh Edition
© 2017 W. H. Freeman and Company
L-arabinose-binding protein of the bacterium *E. coli*



Interactions Cours HB Interaction & H₂O

Pourquoi la notion d'interactions est-elle importante ?

Des exemples ? Vos Connaissances à ce sujet ?

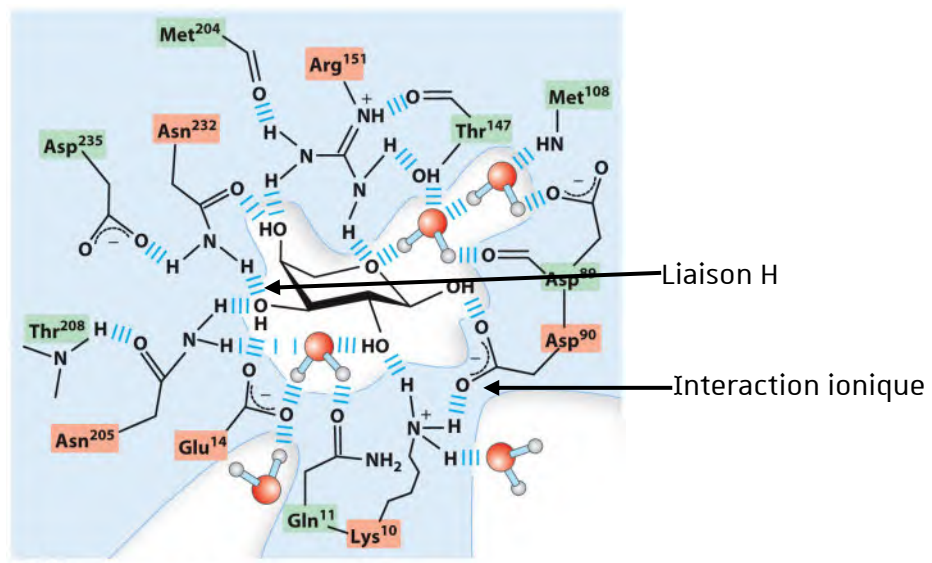
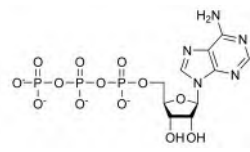
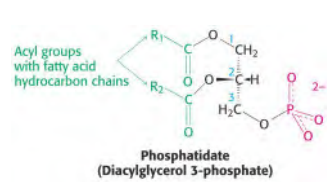
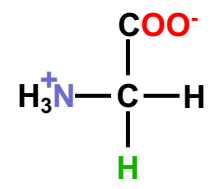
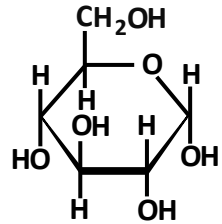
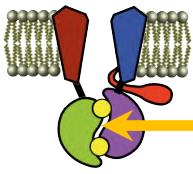


Figure 2-11
 Lehninger Principles of Biochemistry, Seventh Edition
 © 2017 W. H. Freeman and Company
 L-arabinose-binding protein of the bacterium *E. coli*



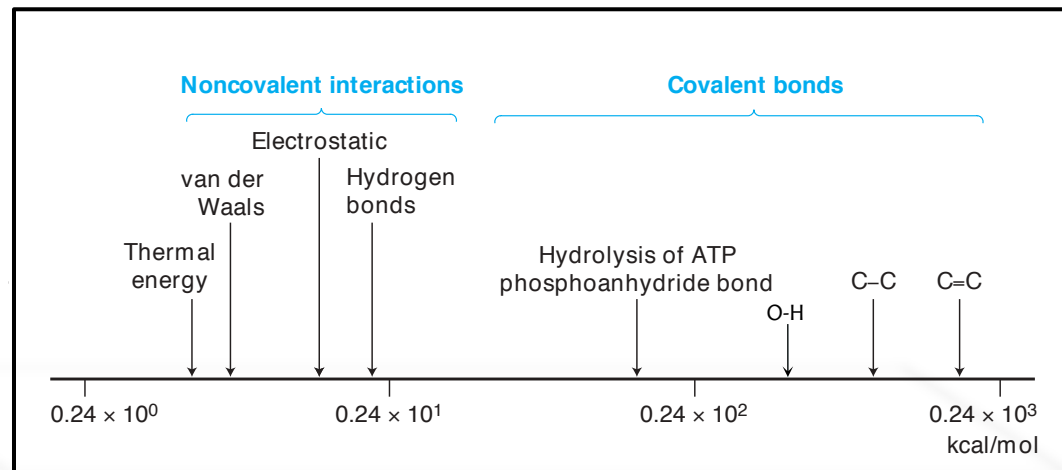
Interactions **Cours HB Interaction & H₂O**

- Liaison covalente
- Liaisons non covalentes
 - Liaison H
 - Interaction électrostatique
 - Interaction de Van der Waals
 - Interaction hydrophobe

L'énergie des différentes liaisons dans les biomolécules

L'énergie individuelle des liaisons non covalentes est relativement faible en comparaison des liaisons covalentes.

Néanmoins, les interactions non covalentes, jouent un rôle **fondamental** dans la structure et la fonction des biomolécules.



modifié de Mol Cell Biol, 5th ed.

énergies relatives (liaisons covalentes / non covalentes)

I. La liaison covalente

1. Quels sont les atomes qu'on lie ou avec lesquels on interagit en biochimie?

- ♦ **C, H, O, N, P**, représentent **99%** de la masse des cellules.
- ♦ les **ions métalliques** (K^+ , Na^+ , Ca^{2+} , Mg^{2+} , Zn^{2+} , Fe^{2+}) jouent un rôle important dans le métabolisme et les réactions chimiques effectuées par des enzymes.

1 H																	2 He				
3 Li	4 Be															5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne
11 Na	12 Mg															13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar
19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr				
37 Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe				
55 Cs	56 Ba		72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn				
87 Fr	88 Ra	↙ ↘ Lanthanides Actinides																			

Legend:
Bulk elements (orange)
Trace elements (yellow)

Figure 1-14






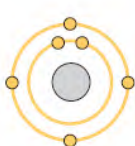
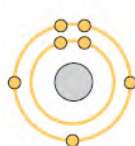
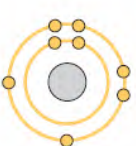






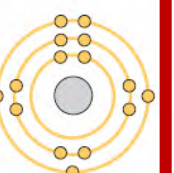



Lehninger Principles of Biochemistry, Seventh Edition
© 2017 W. H. Freeman and Company

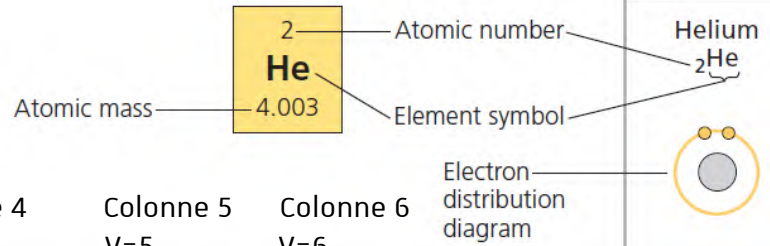
Mariasusai Antony est décédé en 2020, quelques jours après avoir achevé son tableau des isotopes à 90 ans. L'œuvre d'une vie pour ce chercheur de l'Institut national de physique nucléaire et de physique des particules de Strasbourg (IN2P3) qui a également travaillé à un nouveau tableau de Mendeleïev publié en 2019.



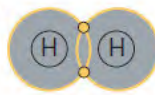

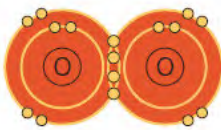

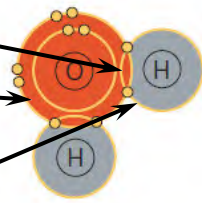

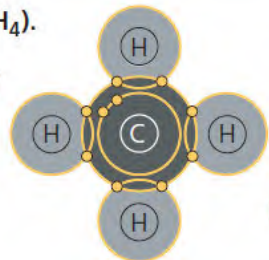

2. Valence de C, H, O, N, P et liaison covalente

Une liaison **covalente** se forme quand 2 atomes **mettent en commun** une ou plusieurs **paires d'électrons** de valence (doublet liant). Pour savoir combien de liaisons covalentes un atome peut former avec un autre atome, il suffi de connaître la **valence** de l'atome = nombre d'électons que l'atome doit perdre ou gagner pour avoir une couche électronique externe saturée (cad 8 = octet si $Z > 6$)

Nb couches électroniques	Colonne 1 V=1							
	Colonne 2 V=2	Colonne 3 V=3	Colonne 4 V=4	Colonne 5 V=5	Colonne 6 V=6			
1	Hydrogen ${}_1\text{H}$ 							Helium ${}_2\text{He}$ 
2	Lithium ${}_3\text{Li}$ 	Beryllium ${}_4\text{Be}$ 	Boron ${}_5\text{B}$ 	Carbon ${}_6\text{C}$ 	Nitrogen ${}_7\text{N}$ 	Oxygen ${}_8\text{O}$ 	Fluorine ${}_9\text{F}$ 	Neon ${}_{10}\text{Ne}$ 
3	Sodium ${}_{11}\text{Na}$ 	Magnesium ${}_{12}\text{Mg}$ 	Aluminum ${}_{13}\text{Al}$ 	Silicon ${}_{14}\text{Si}$ 	Phosphorus ${}_{15}\text{P}$ 	Sulfur ${}_{16}\text{S}$ 	Chlorine ${}_{17}\text{Cl}$ 	Argon ${}_{18}\text{Ar}$ 



Valence de C, H, O, N, P et liaison covalente

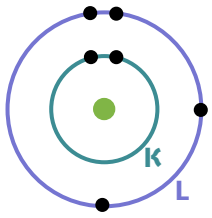
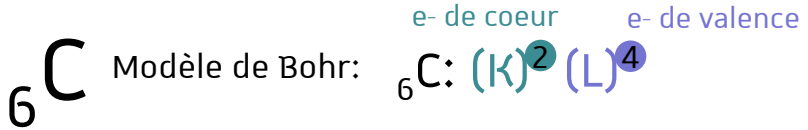
Name and Molecular Formula	Electron Distribution Diagram	Lewis Dot Structure and Structural Formula	Space-Filling Model
(a) Hydrogen (H₂). Two hydrogen atoms share one pair of electrons, forming a single bond.		H:H H—H	
(b) Oxygen (O₂). Two oxygen atoms share two pairs of electrons, forming a double bond.		$\ddot{O}::\ddot{O}$ O=O	
(c) Water (H₂O). Two hydrogen atoms and one oxygen atom are joined by single bonds, forming a molecule of water.		$\begin{array}{c} \ddot{O}:H \\ \\ H \end{array}$ O—H H	
(d) Methane (CH₄). Four hydrogen atoms can satisfy the valence of one carbon atom, forming methane.		$\begin{array}{c} H \\ \vdots \\ H:C:H \\ \vdots \\ H \\ \\ H-C-H \\ \\ H \end{array}$	

Doublet liant

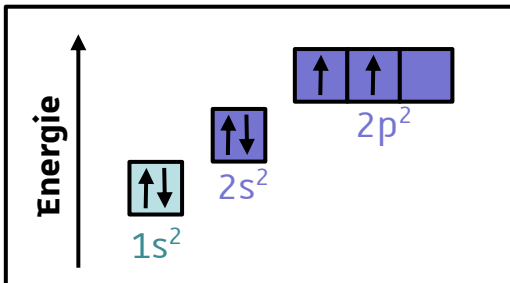
La couche électronique externe de l'O est saturée (8 e⁻)

La couche électronique externe de l'H est saturée (2 e⁻; le doublet liant est comptabilisé pour les 2 atomes)

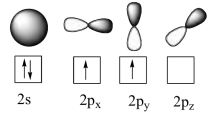
2.1. Pourquoi valence C = 4 et fait 4 liaisons covalentes ?



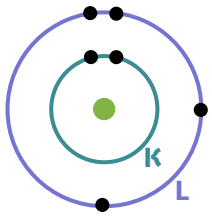
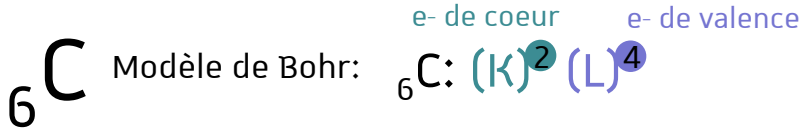
Modèle de Schrödinger: ${}_6\text{C}: 1s^2 2s^2 2p^2$
 Dans son état fondamental



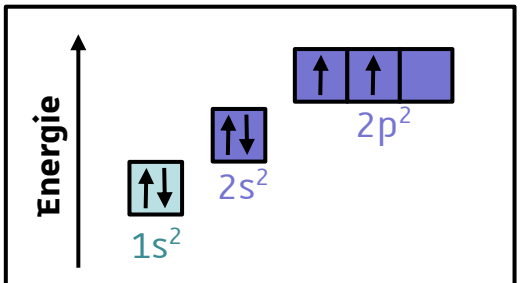
Dans son état fondamental



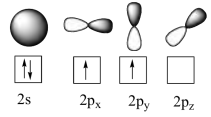
2.1. Pourquoi valence C = 4 et fait 4 liaisons covalentes ?



Modèle de Schrödinger: ${}_6\text{C}: 1s^2 2s^2 2p^2$
 Dans son état fondamental

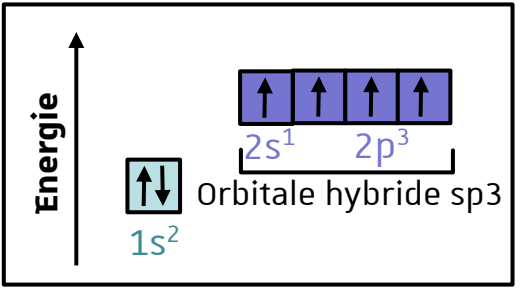


Dans son état fondamental

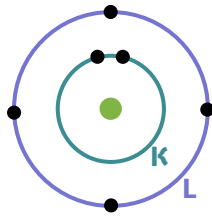
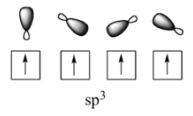


Les e- d'une couche énergétique ont toujours tendance à remplir le maximum de cases quantiques

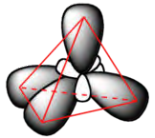
Modèle de Schrödinger: ${}_6\text{C}: 1s^2 2s^1 2p^3$
 Dans son état excité



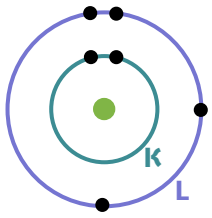
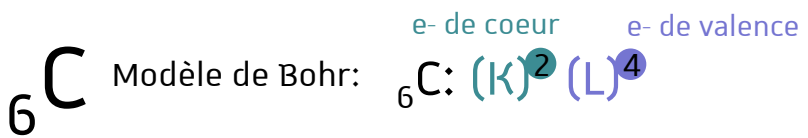
Dans son état excité



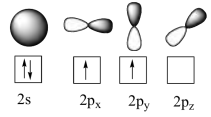
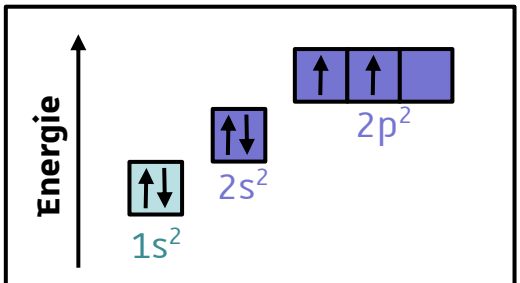
<https://chem.libretexts.org/>



2.1. Pourquoi valence C = 4 et fait 4 liaisons covalentes ?

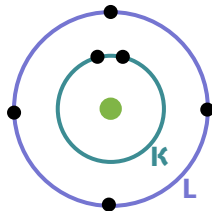
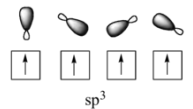
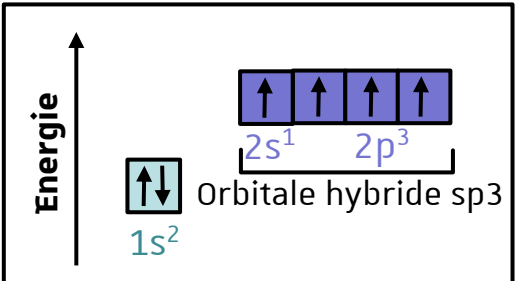


Modèle de Schrödinger: ${}_6\text{C} : 1s^2 2s^2 2p^2$
 Dans son état fondamental

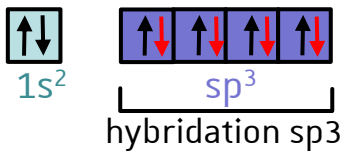
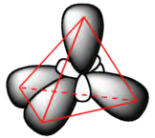


Les e- d'une couche énergétique ont toujours tendance à remplir le maximum de cases quantiques

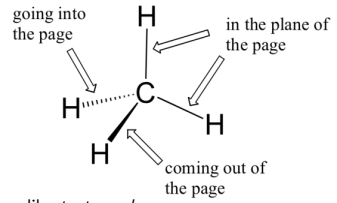
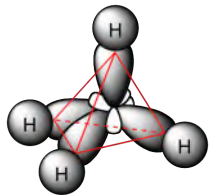
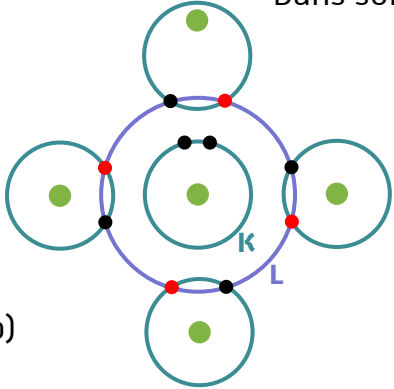
Modèle de Schrödinger: ${}_6\text{C} : 1s^2 2s^1 2p^3$
 Dans son état excité



<https://chem.libretexts.org/>



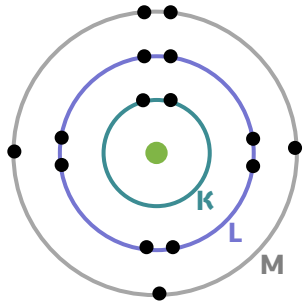
(1 orbitale 2S et 3 orbitales 2p)



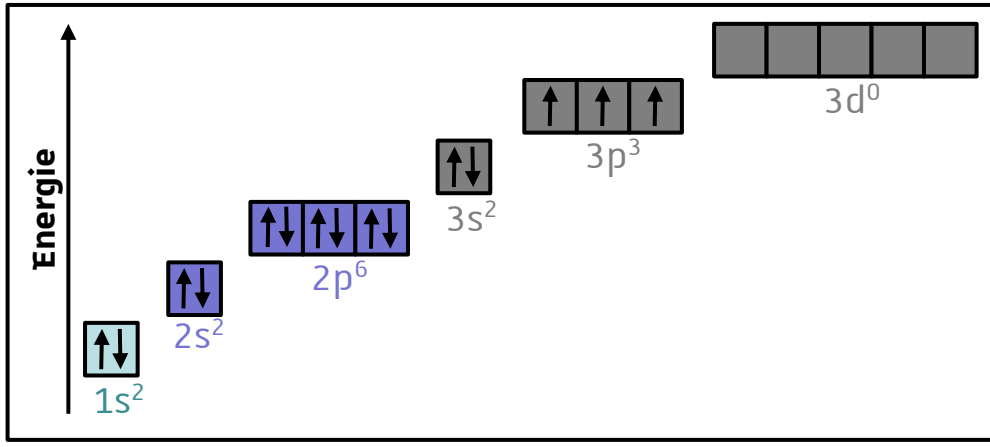
<https://chem.libretexts.org/>

2.2. Pourquoi valence P=5 mais et fait 5 liaisons covalentes ?

^{15}P Modèle de Bohr: $^{15}\text{P}: (\text{K})^2 (\text{L})^8 (\text{M})^5$
e- de coeur e- de valence



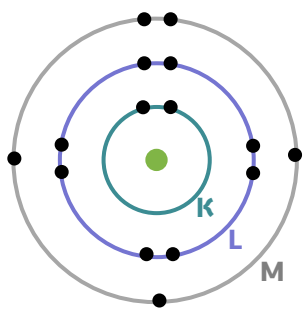
Modèle de Schrödinger: $^7\text{N}: 1s^2 2s^2 2p^3 3s^2 3p^3$
 Dans son état fondamental



2.2. Pourquoi valence P=5 mais et fait 5 liaisons covalentes ?

^{15}P Modèle de Bohr: $^{15}\text{P}: (\text{K})^2 (\text{L})^8 (\text{M})^5$

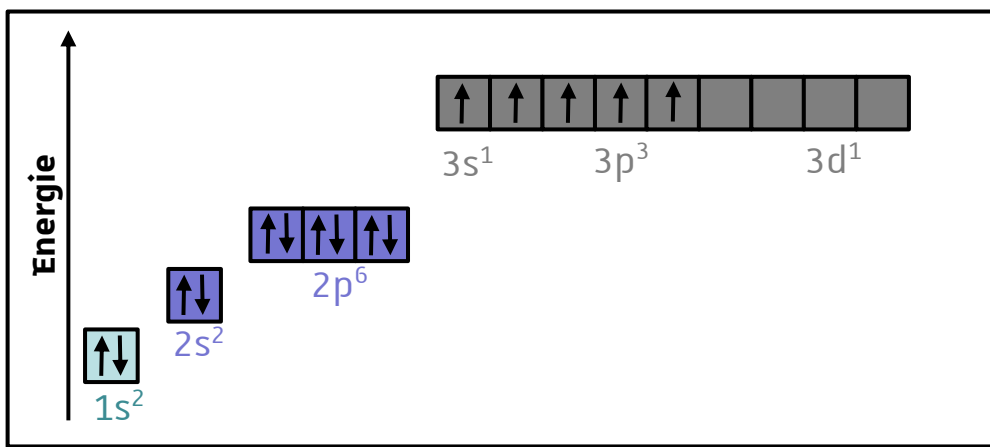
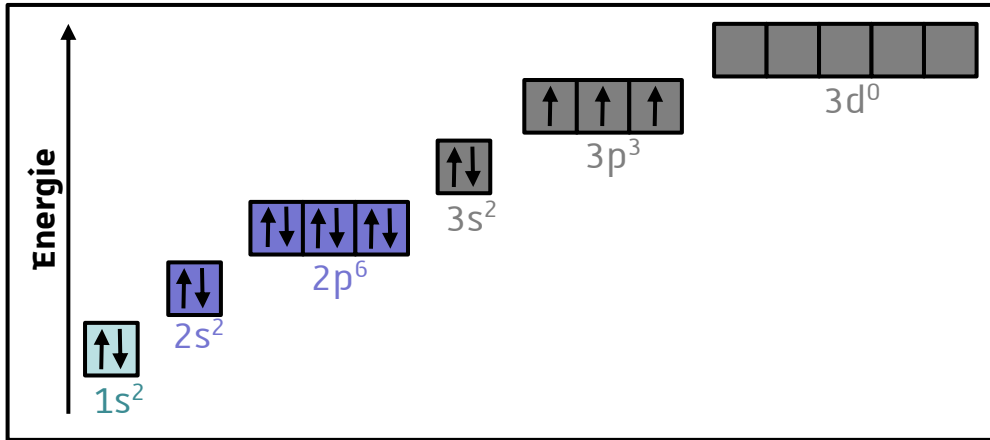
e- de coeur e- de valence



Modèle de Schrödinger: $^7\text{N}: 1s^2 2s^2 2p^3 3s^2 3p^3$
 Dans son état fondamental

Les e- d'une couche énergétique
 ont toujours tendance à remplir
 le maximum de cases quantiques

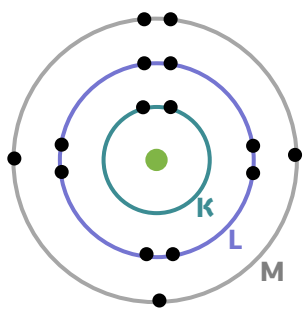
Schrödinger: $^7\text{N}: 1s^2 2s^2 2p^3 3s^1 3p^3 3d^1$
 Dans son état excité



2.2. Pourquoi valence P=5 mais et fait 5 liaisons covalentes ?

Modèle de Bohr: ${}_{15}\text{P}: (\text{K})^2 (\text{L})^8 (\text{M})^5$

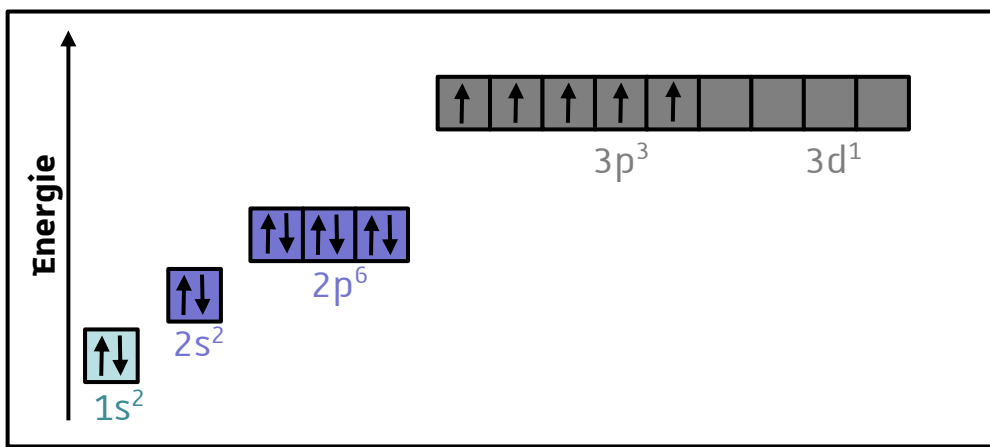
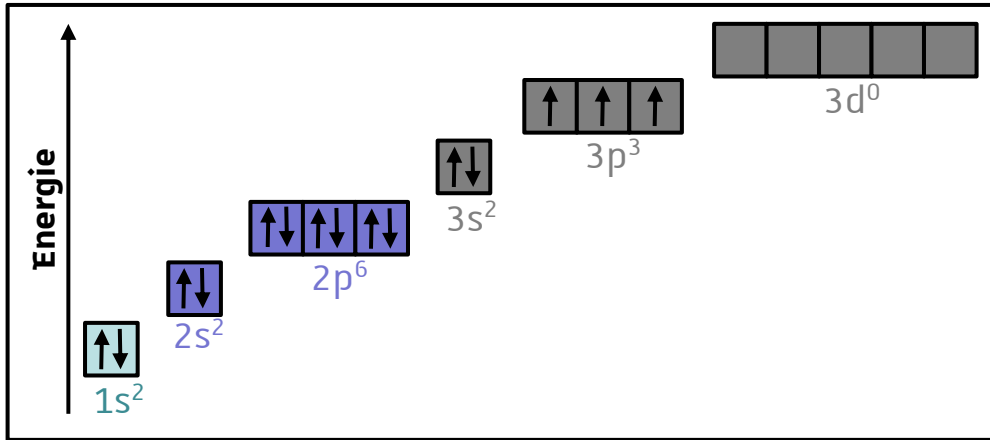
e- de coeur e- de valence



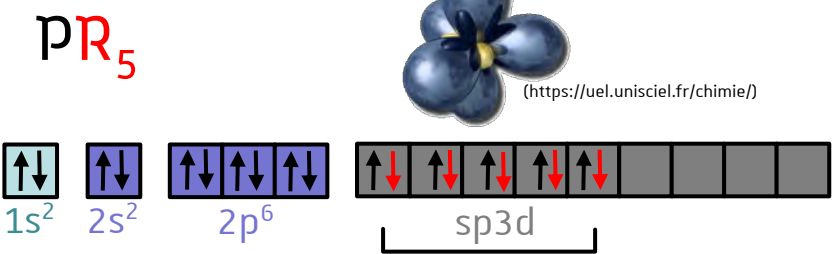
Modèle de Schrödinger: ${}_{7}\text{N}: 1s^2 2s^2 2p^3 3s^2 3p^3$
 Dans son état fondamental

Les e- d'une couche énergétique ont toujours tendance à remplir le maximum de cases quantiques

Schrödinger: ${}_{7}\text{N}: 1s^2 2s^2 2p^3 3s^1 3p^3 3d^1$
 Dans son état excité



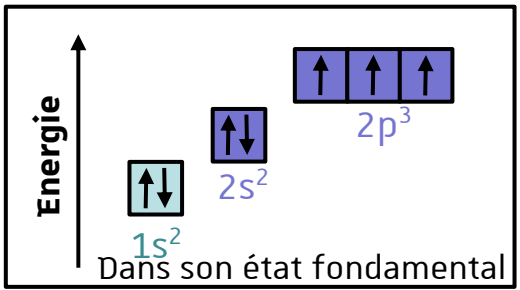
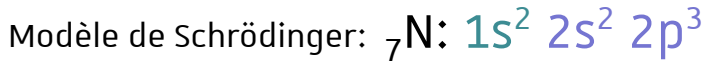
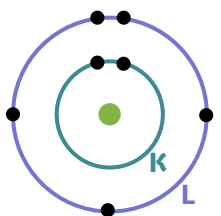
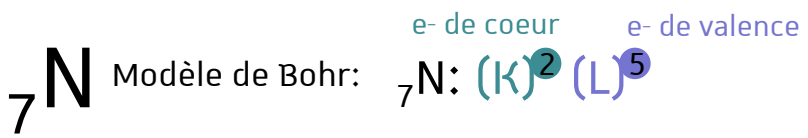
(<https://uel.unisciel.fr/chimie/>)



hybridation sp3d

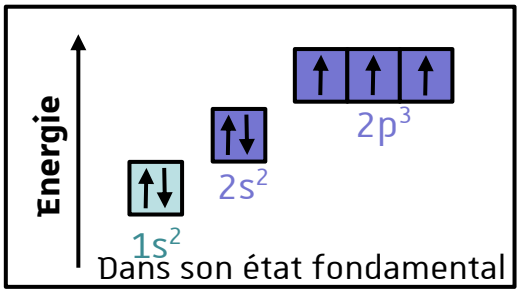
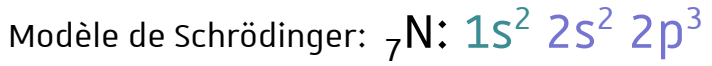
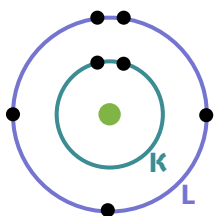
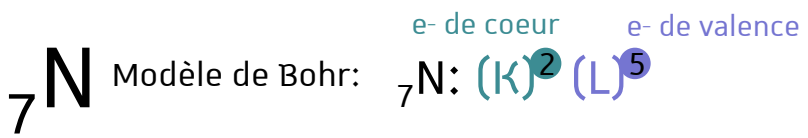
1 orbitale 3s 3 orbitales 3P et 1 orbitale 3d

2.3. Pourquoi valence N=5 mais N fait 3 liaisons covalentes ?



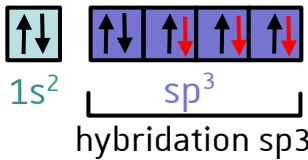
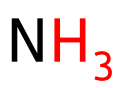
La couche 2 est trop petite pour contenir une sous-couche 2d et c'est pourquoi l'N ne peut pas faire 5 liaisons covalentes.

2.3. Pourquoi valence N=5 mais N fait 3 liaisons covalentes ?

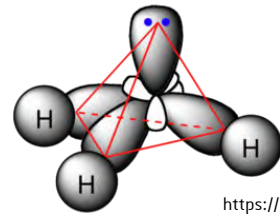
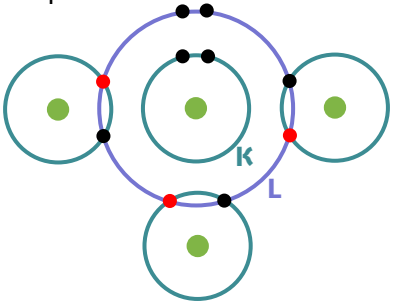


La couche 2 est trop petite pour contenir une sous-couche 2d et c'est pourquoi l'N ne peut pas faire 5 liaisons covalentes.

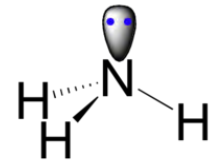
Dans NH₃ on a quand même 4 orbitales avec 1 orbitale occupée par le doublet d'e- libres



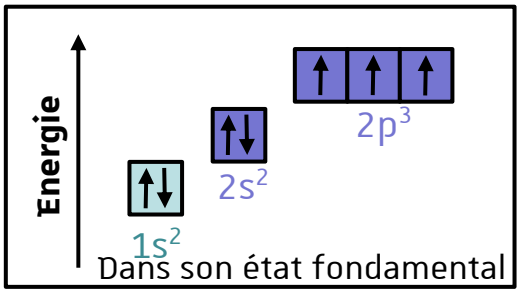
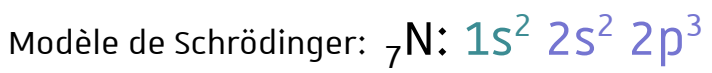
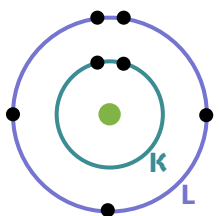
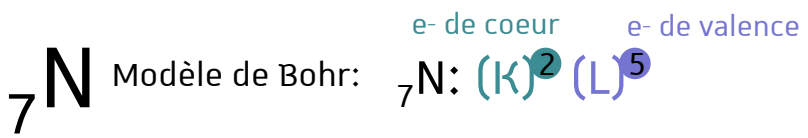
(1 orbitale 2s et 3 orbitale 2p)



<https://chem.libretexts.org/>

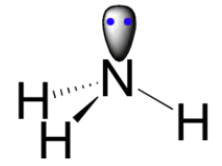
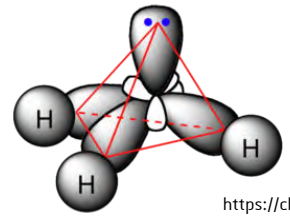
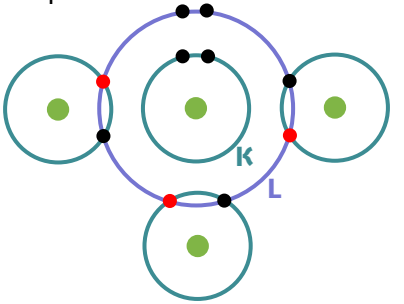
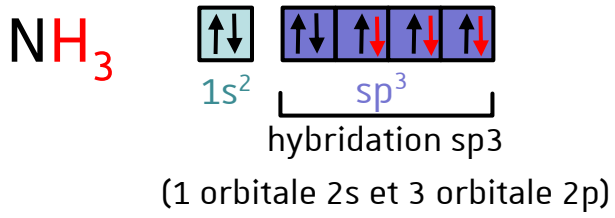


2.3. Pourquoi valence N=5 mais N fait 3 liaisons covalentes ?

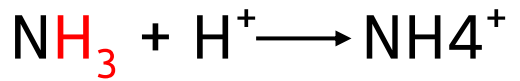


La couche 2 est trop petite pour contenir une sous-couche 2d et c'est pourquoi l'N ne peut pas faire 5 liaisons covalentes.

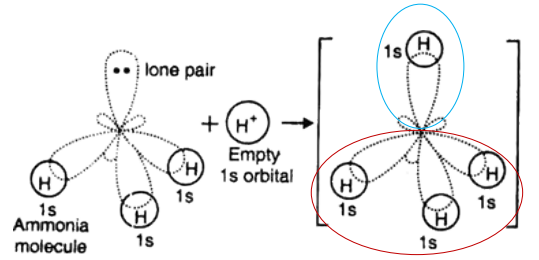
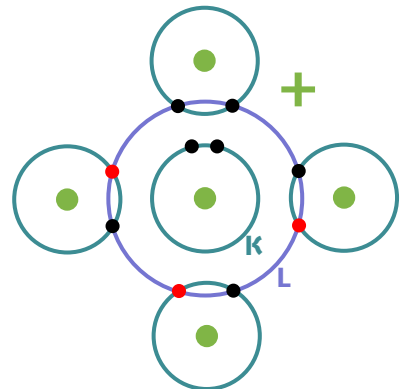
Dans NH₃ on a quand même 4 orbitales avec 1 orbitale occupée par le doublet d'e- libres



<https://chem.libretexts.org/>



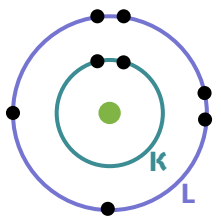
L'ammoniaque est une espèce riche en e- (nucléophile) à cause de sa paire d'e- non liant et peut donner cette paire à un atome électrophile comme par exemple un proton H⁺.



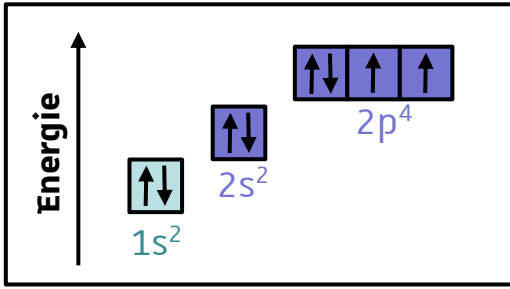
4 orbitales identiques mais **3 liaisons covalentes** et **1 liaison de coordination**

2.4. Pourquoi valence O=6 mais O fait 2 liaisons covalentes ?

8_0 Modèle de Bohr: ${}^8_0\text{O} : (\text{K})^2 (\text{L})^6$
e- de coeur e- de valence



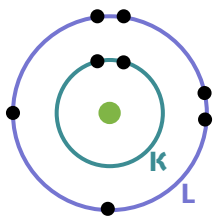
Modèle de Schrödinger: ${}^8_0\text{O} : 1s^2 2s^2 2p^4$



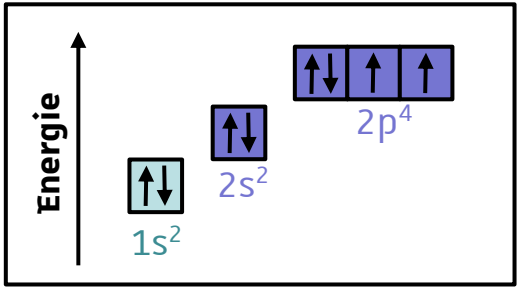
Dans son état fondamental

2.4. Pourquoi valence O=6 mais O fait 2 liaisons covalentes ?

${}^8\text{O}$ Modèle de Bohr: ${}^8\text{O}: (\text{K})^2 (\text{L})^6$
 e- de coeur e- de valence

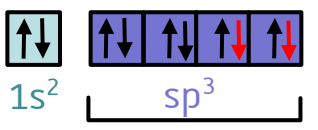


Modèle de Schrödinger: ${}^8\text{O}: 1s^2 2s^2 2p^4$



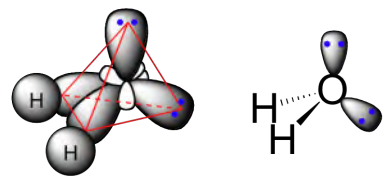
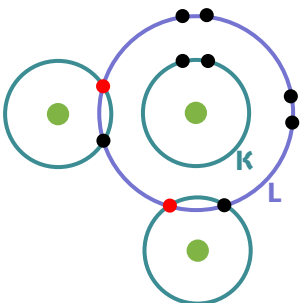
Dans son état fondamental

OH_2



hybridation sp^3

(1 orbitale 2s et 3 orbitale 2p)



<https://chem.libretexts.org/>

3. Les liaisons covalentes des molécules biologiques

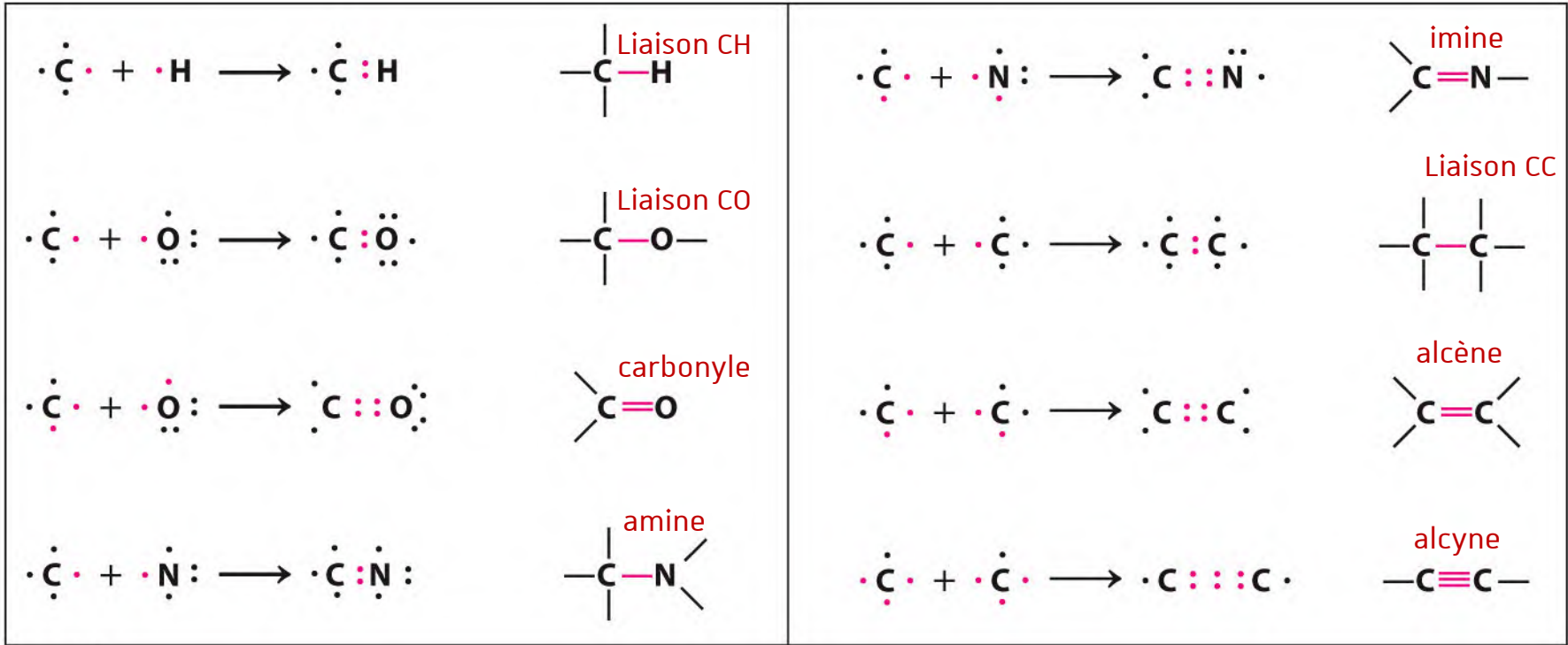


Figure 1-15
 Lehninger Principles of Biochemistry, Seventh Edition
 © 2017 W. H. Freeman and Company

4. Les groupements fonctionnels des molécules biologiques

Nomenclature:

1C: Meth...

2C: Eth... ou Acét...

3C: Prop...

4C: But...

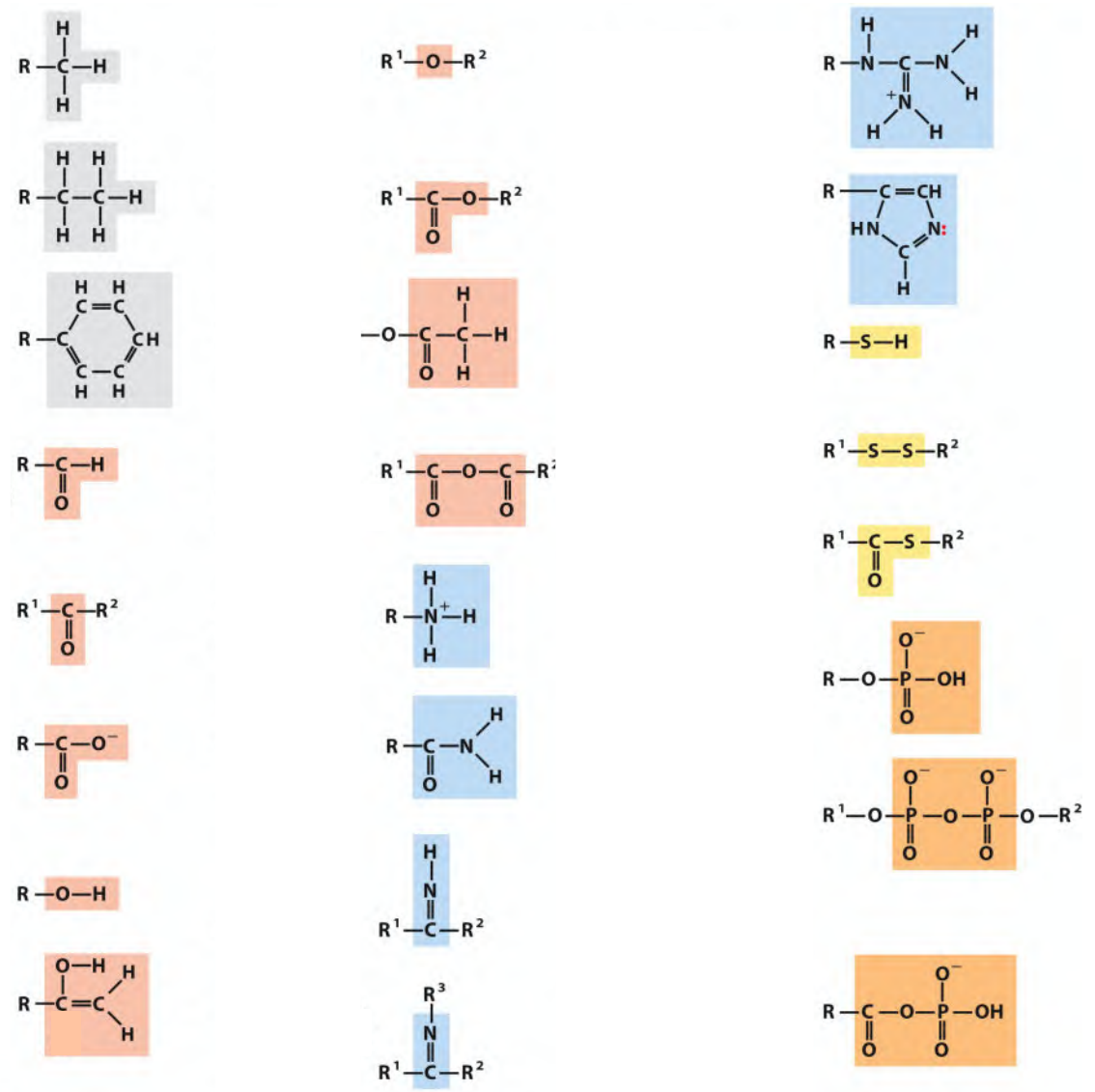


Figure 1-17
 Lehninger Principles of Biochemistry, Seventh Edition
 © 2017 W. H. Freeman and Company

4. Les groupements fonctionnels des molécules biologiques

Nomenclature:

- 1C: Meth...
- 2C: Eth... ou Acét...
- 3C: Prop...
- 4C: But...

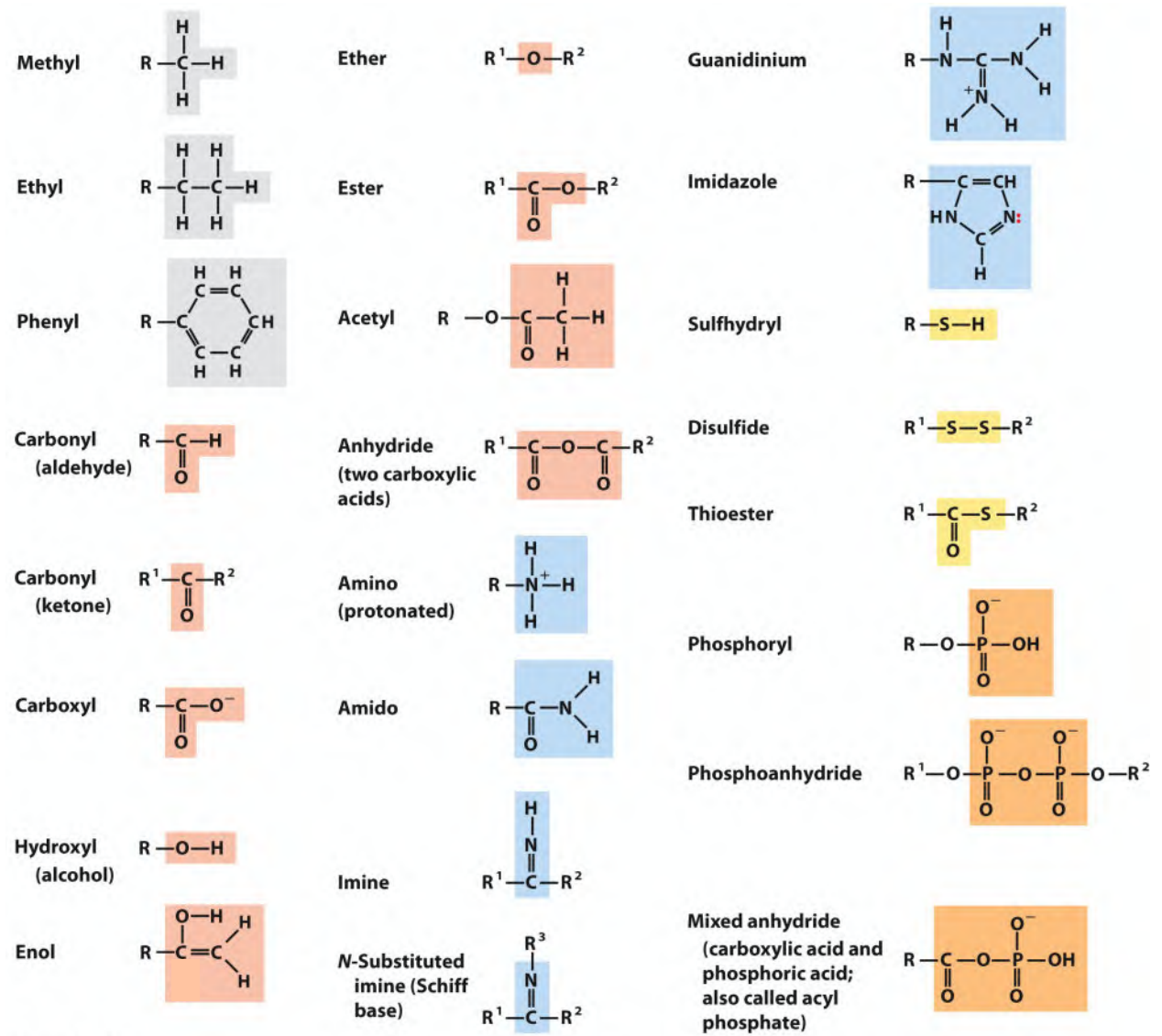
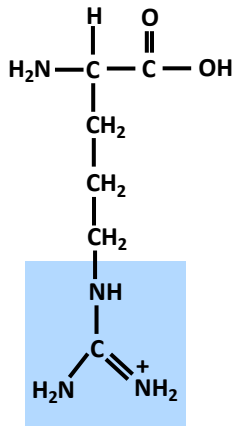
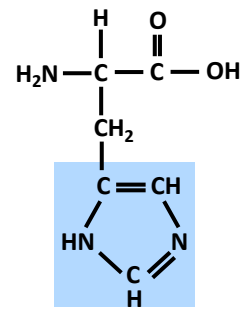
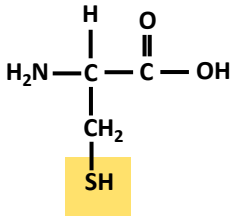
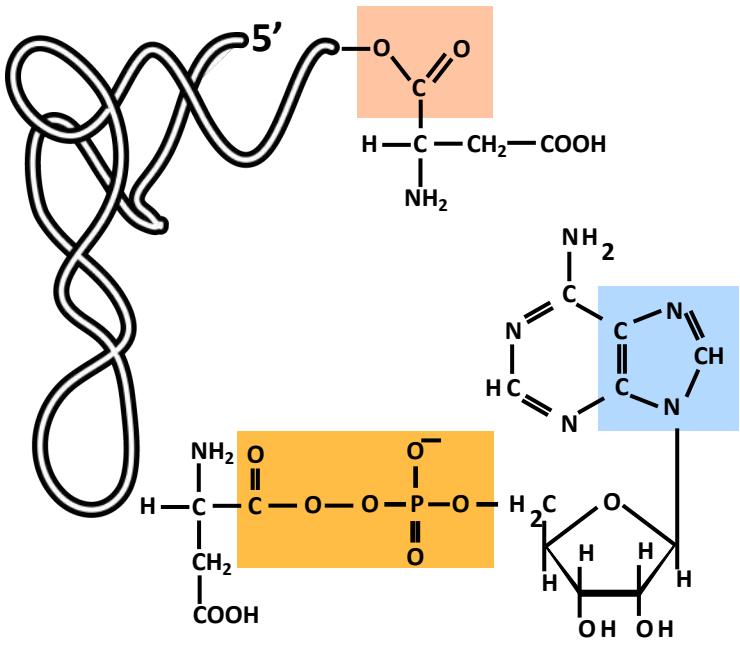
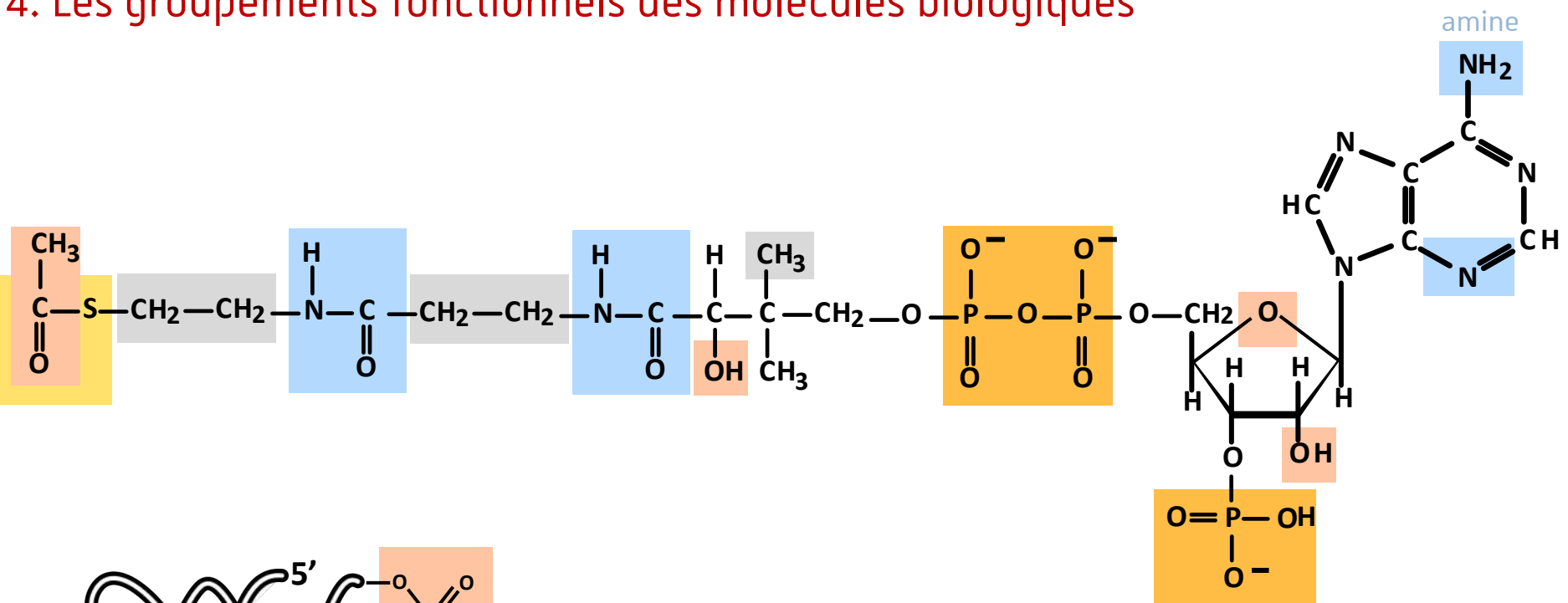
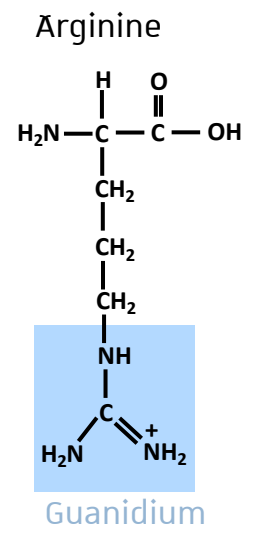
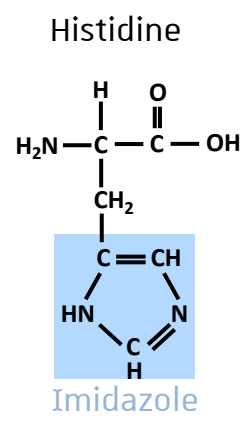
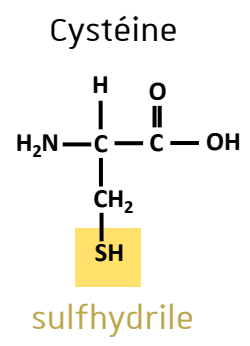
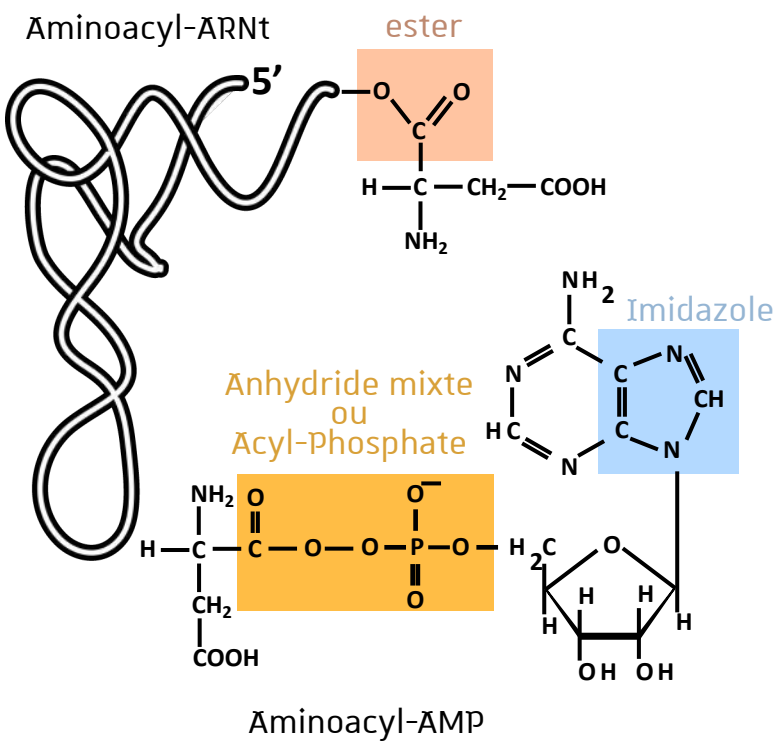
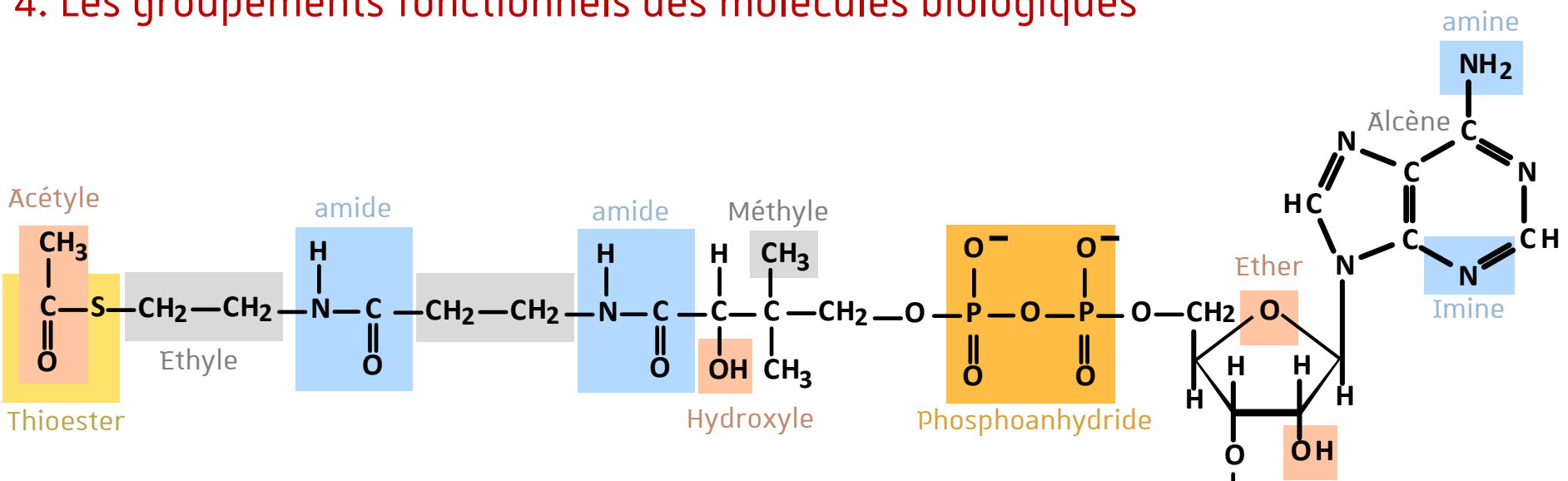


Figure 1-17
 Lehninger Principles of Biochemistry, Seventh Edition
 © 2017 W. H. Freeman and Company

4. Les groupements fonctionnels des molécules biologiques



4. Les groupements fonctionnels des molécules biologiques



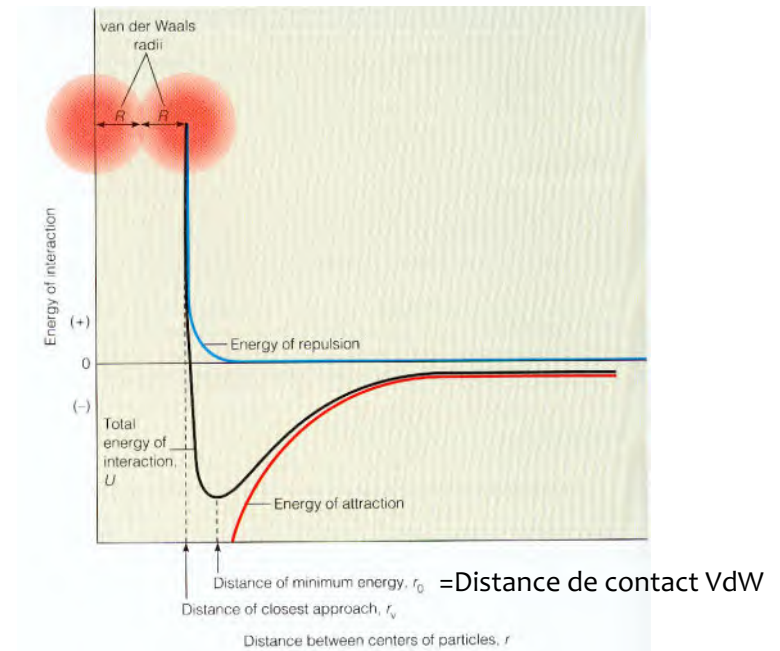
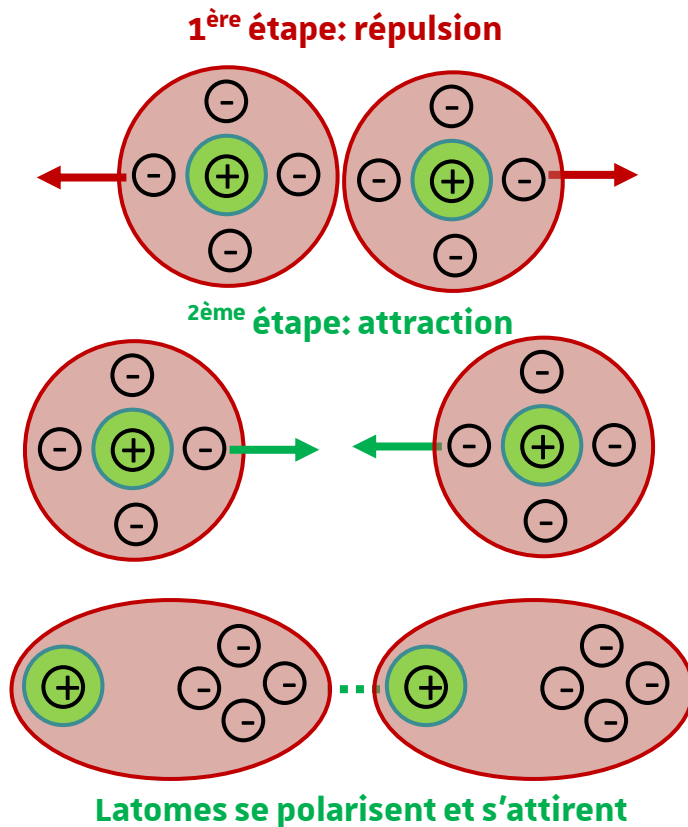
II. Les interactions non covalentes en biochimie et l'implication de l'eau

1. La force de van der Waals

La **force de van der Waals** ou **liaison de van der Waals** est une force à courte portée due à la fluctuation des nuages d'électrons entourant le noyau de 2 atomes ou molécules non chargées.

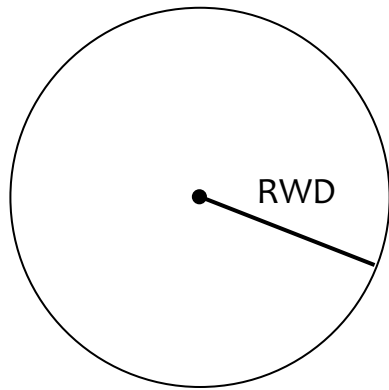
Les forces de van der Waals sont des **forces électrostatiques causées par un moment dipolaire fluctuant temporairement** résultant d'un bref **déplacement d'électrons orbitaux d'un côté d'un atome ou d'une molécule**, ce qui crée un déplacement similaire dans les atomes ou molécules adjacents. Les forces de Van der Waals sont des **interactions non spécifiques** qui peuvent se former entre n'importe quel type de molécules, quelle que soit leur structure chimique.

(<https://www.aquaportail.com/dictionnaire/definition/10287/force-de-van-der-waals>)



Le rayon de Van Der Waals (RWD) correspond à la distance minimale d'approche de 2 atomes

2. Le Rayon de van der Waals (RWD)



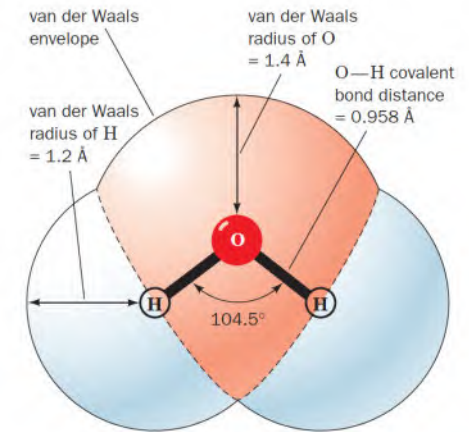
RWD : C'est le rayon occupé par un atome sans liaisons

Chaque élément à un RWD caractéristique

Elément	rayon de van der Waals (Å)	rayon covalent pour une liaison simple (Å)
H	1,1	0,3
O	1,5	0,66
N	1,5	0,70
C	1,7	0,77
S	1,8	1,04
P	1,9	1,10
I	2,1	1,33

Plus l'atome est grand plus RWD est grand

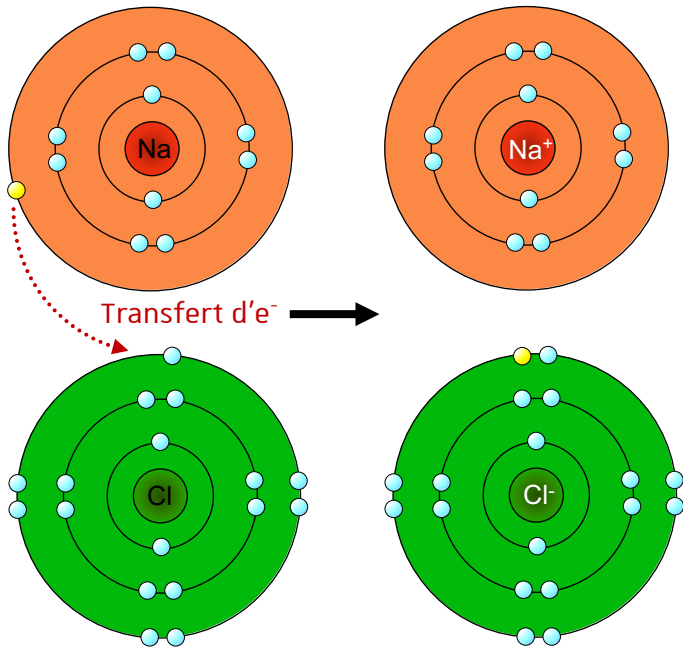
Le rayon covalent est < à RWD



Modèle de van der Waals de H₂O

3. La liaison ionique: une forme d'interaction électrostatique

Une **liaison ionique** est une **attraction électrostatique qui unit des ions de charges opposées** dans les composés ioniques ou dans les phénomènes de surface, typiquement de sphère externe. En qualité de liaison électrovalente, elle est souvent associée à une liaison covalente. Les types d'éléments formant des liaisons ioniques sont les **métaux et les non-métaux**.



La liaison ionique est le **transfert complet d'électrons de valence entre les atomes qui génère deux ions de charge opposée**.

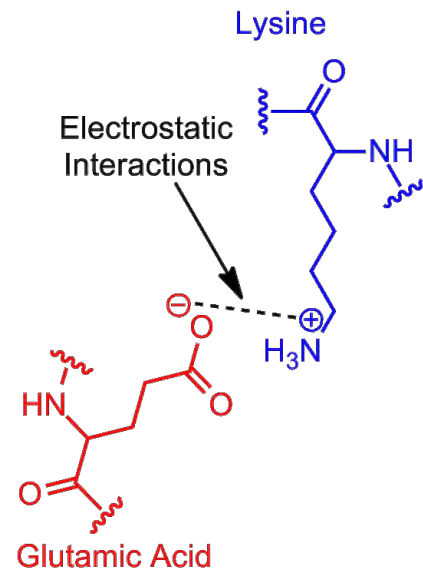
Dans les liaisons ioniques, le métal perd des électrons pour devenir un cation, tandis que le non-métal accepte ces électrons pour devenir un anion.

Lorsque les deux ions se combinent *via* une liaison ionique, ils forment des composés ioniques.

L'électronégativité = force avec laquelle l'atome attire ou retient les électrons.

Les liaisons ioniques se forment lorsqu'il y a une **différence d'électronégativité élevée entre les atomes** qui se traduit par une attraction électrostatique entre les électrons d'un atome et les noyaux de l'autre atome.

Après transfert, **configuration électronique de gaz inerte** stable = sphères les plus externes (valence) des atomes sont complètes (ici octet).

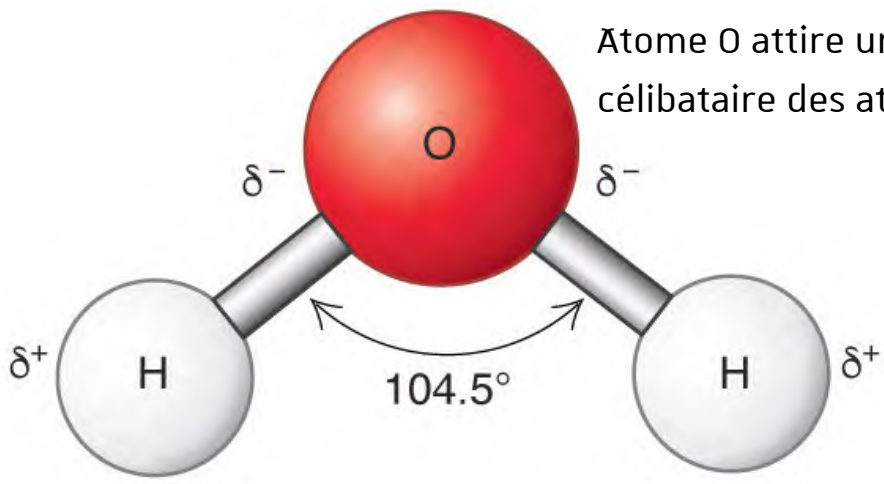


4. L'eau: un dipôle électrique qui forme des liaisons hydrogène

Electronégativité

Certains atomes sont plus électronégatifs que d'autres.

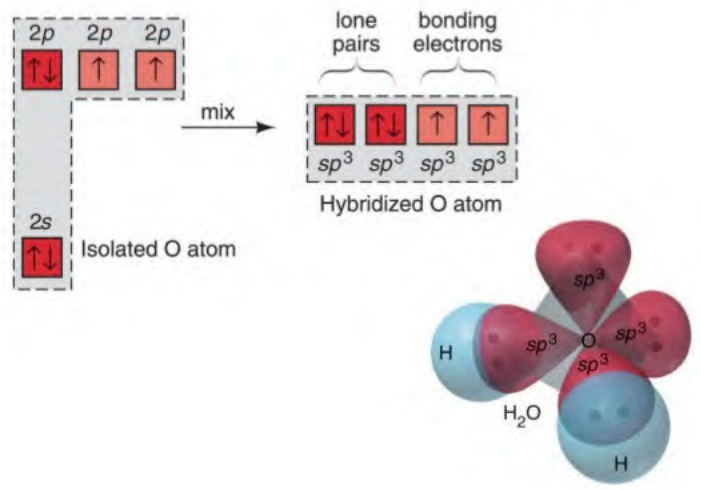
Dans une **liaison covalente**, ils vont avoir tendance à attirer des électrons. Il y aura donc création d'une charge partielle négative (δ^-) et positive (δ^+), soit **un dipôle**.



Atome O attire un électron célibataire des atomes H.

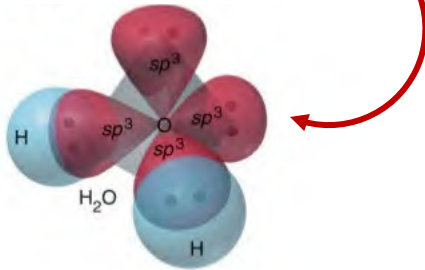
Modèle 'Ball-and-stick'

Figure 11.5 continued The sp^3 hybrid orbitals in H_2O .



4. L'eau: un dipôle électrique qui forment des liaisons hydrogène

Quand un H lié par covalence à un atome fortement électronégatif (O, N) est proche d'un atome électronégatif qui porte un doublet d'électrons non liants



Attraction électrostatique entre l'atome O (δ^-) d'une molécule d'eau et un atome H (δ^+) d'une autre molécule créant une liaison appelée

liaison hydrogène (H-bond)

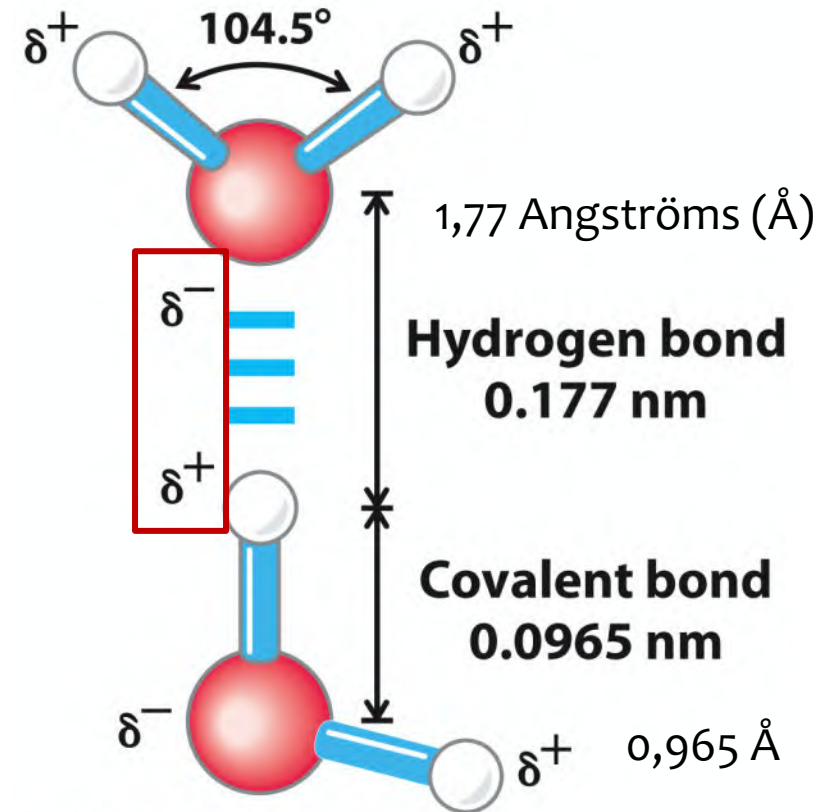
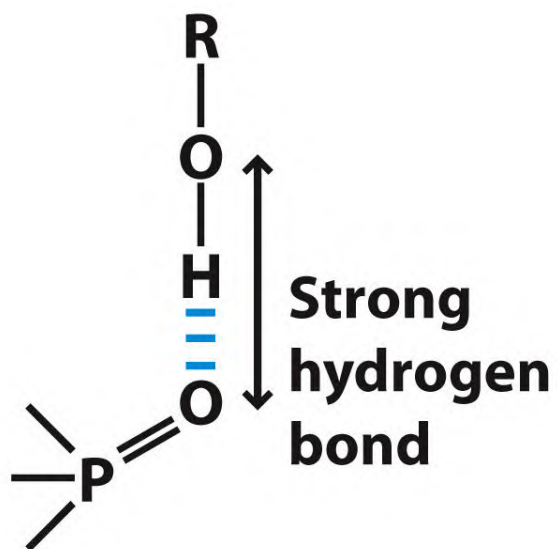


Figure 2-1b
Lehninger Principles of Biochemistry, Seventh Edition
© 2017 W. H. Freeman and Company

4.1. Liaisons hydrogène entre deux molécules d'H₂O: 2 orientations & 2 forces

Liaison O-H de l'eau
même axe que liaison H



Atome accepteur n'est pas
aligné avec la liaison O-H

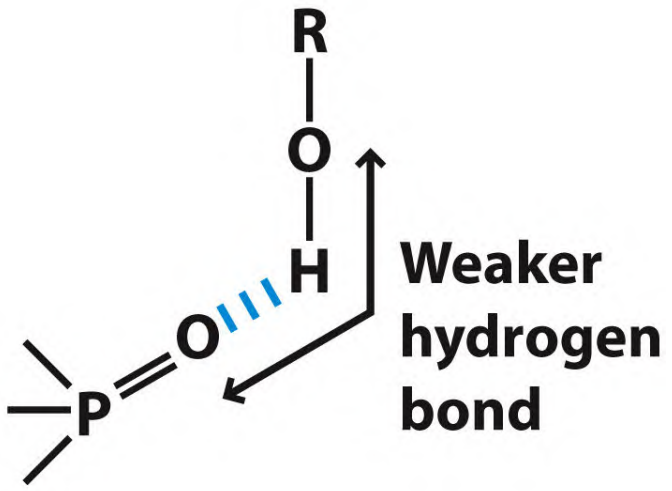
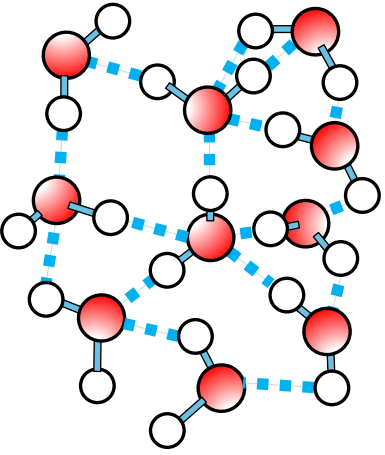


Figure 2-5
Lehninger Principles of Biochemistry, Seventh Edition
© 2017 W. H. Freeman and Company

La force des liaisons H est plus importante lorsque les atomes impliqués sont alignés

4.2. Liaisons hydrogènes de l'eau liquide ou solide



Réseau fluctuant (car très dynamique), avec 3 à 4 liaisons H en moyenne par molécule d'eau.

	distance	1/2 vie
glace:	1.77 Å	1.0×10^{-12} s
liquide:	1.9 Å	20.0×10^{-12} s
vapeur:	2.05 Å	0.1×10^{-12} s

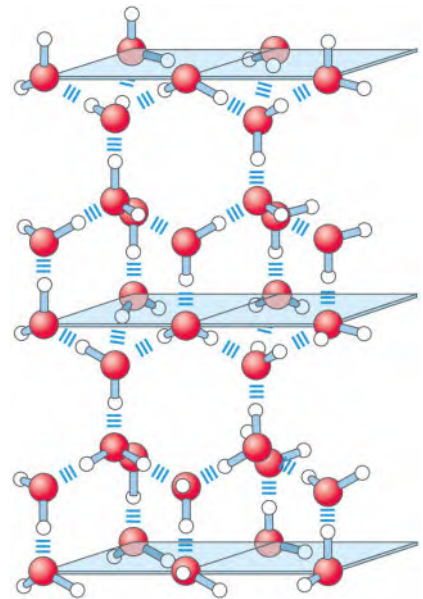


Figure 2-2
Lehninger Principles of Biochemistry, Seventh Edition
© 2017 W. H. Freeman and Company

Chaque molécule d'eau est liée par des liaisons H avec les 4 molécules d'eau les plus proches dans un réseau ordonné (cristallin)

4.3. Liaisons hydrogènes: à quoi ça sert ?

- source des propriétés uniques de l'eau
- structure et fonction des protéines
- structure et fonction de l'ADN
- structure et fonction des polysaccharides
- liaison enzyme – substrat
- liaison protéine - ligand
- appariement ARNm et ARNt: décodage codons

“I believe that as the methods of structural chemistry are further applied to physiological problems, it will be found that the significance of the hydrogen bond for physiology is greater than that of any other single structural feature.”

Linus Pauling, *The Nature of the Chemical Bond*, 1939 (Prix Nobel de Chimie 1954)

5. Liaisons H en biologie: les groupements donneurs & accepteurs impliqués

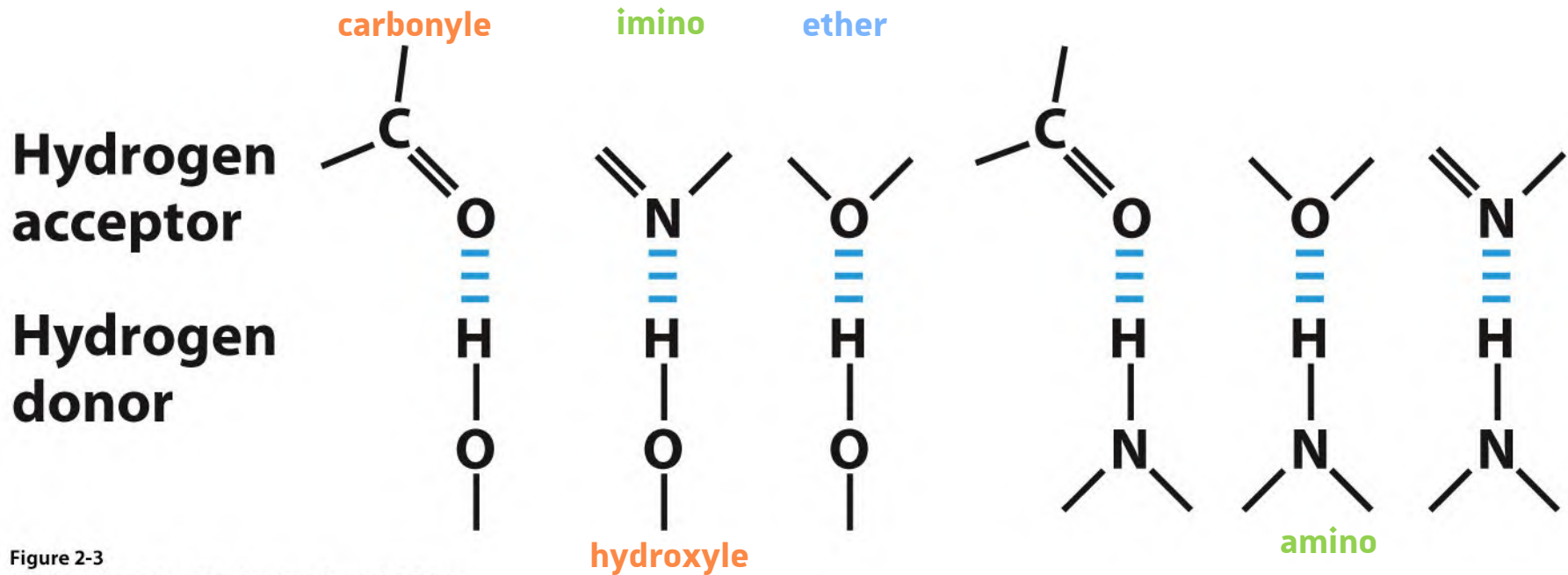


Figure 2-3
Lehninger Principles of Biochemistry, Seventh Edition
© 2017 W. H. Freeman and Company

Donneur: O d'un **carbonyle** ou d'un **ether** ou N d'un **imino**

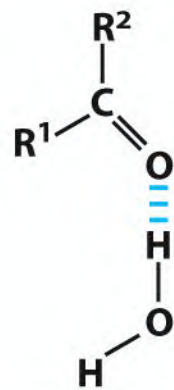
Accepteur: H d'un **hydroxyle** ou N d'un **amino**

5.1. Liaisons H en biologie: quelques exemples

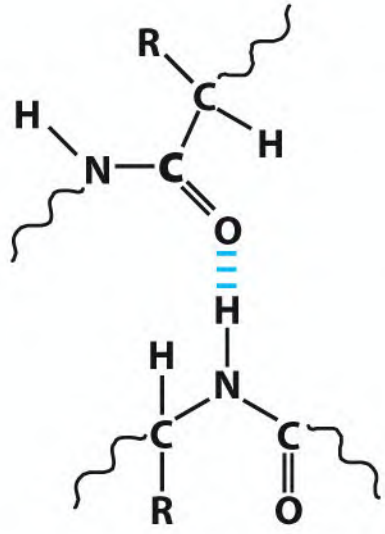
Between the hydroxyl group of an alcohol and water



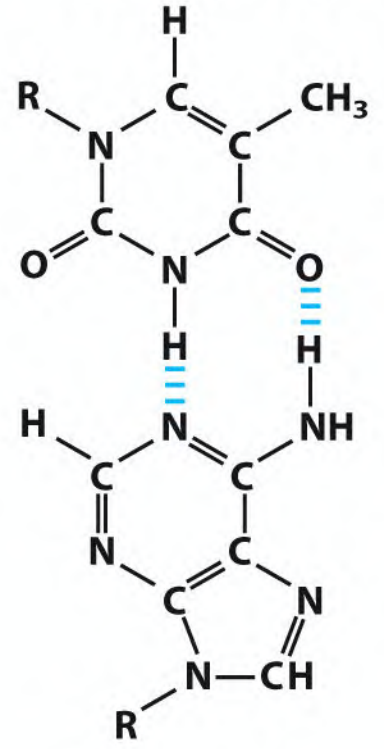
Between the carbonyl group of a ketone and water



Between peptide groups in polypeptides



Between complementary bases of DNA



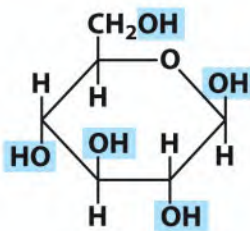
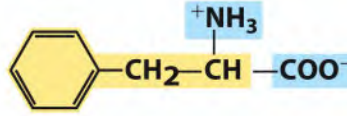
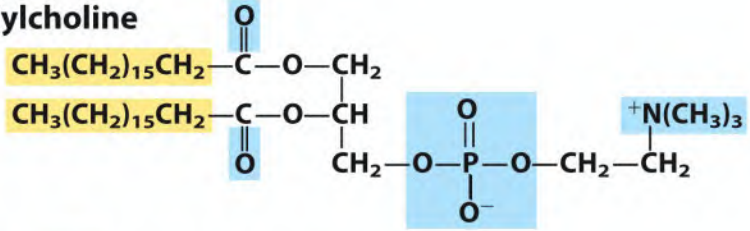

Thymine

Adenine

Figure 2-4
Lehninger Principles of Biochemistry, Seventh Edition
© 2017 W. H. Freeman and Company

6. Interaction hydrophobes: molécules polaire et de non polaires

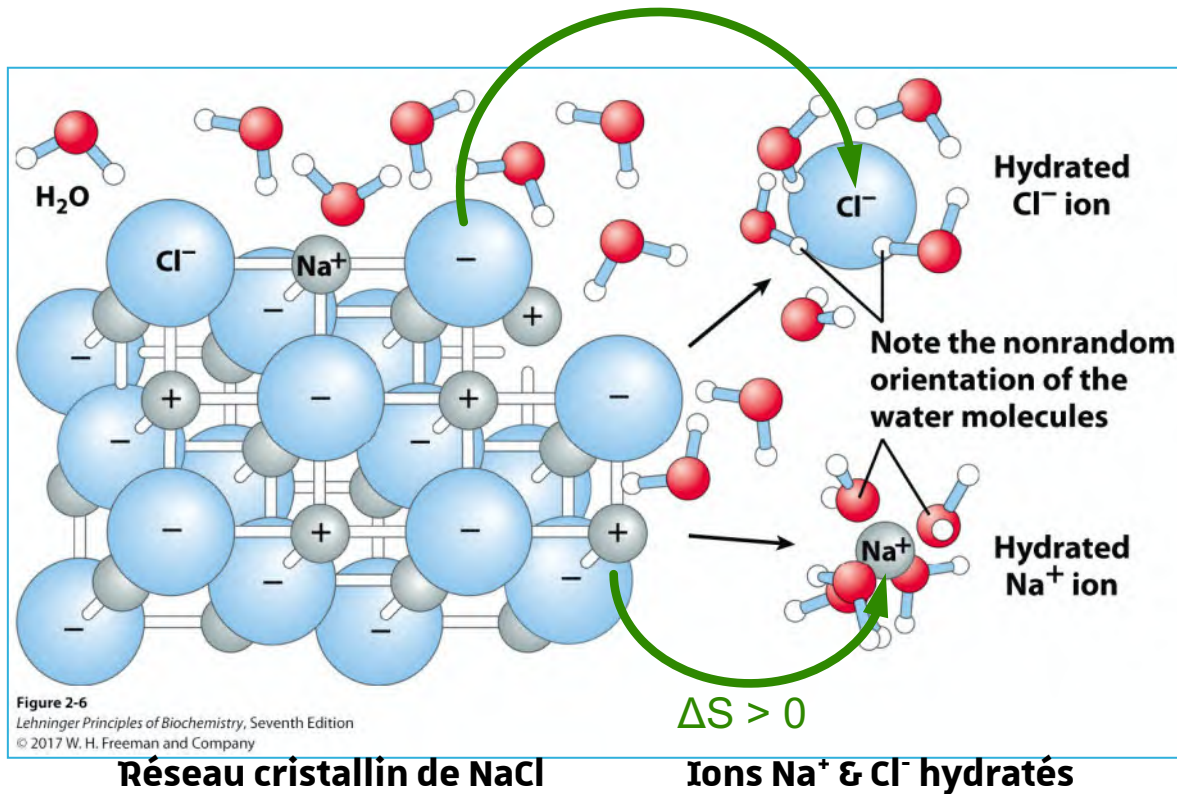
TABLE 2-2 Some Examples of Polar, Nonpolar, and Amphipathic Biomolecules (Shown as Ionic Forms at pH 7)

Polar	Nonpolar
Glucose 	Typical wax $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_7-\text{CH}=\text{CH}-(\text{CH}_2)_6-\text{CH}_2-\overset{\text{O}}{\parallel}{\text{C}}-\text{O}-\text{CH}_2$ $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_7-\text{CH}=\text{CH}-(\text{CH}_2)_7-\text{CH}_2$
Glycine $^+\text{NH}_3-\text{CH}_2-\text{COO}^-$	Amphipathic Phenylalanine 
Aspartate $-\text{OOC}-\text{CH}_2-\overset{+}{\text{N}}\text{H}_3-\text{CH}-\text{COO}^-$	Phosphatidylcholine 
Lactate $\text{CH}_3-\underset{\text{OH}}{\text{CH}}-\text{COO}^-$	
Glycerol $\text{HOCH}_2-\underset{\text{OH}}{\text{CH}}-\text{CH}_2\text{OH}$	
	

La nature polaire de la liaison covalente O-H de l'eau fait de cette molécule un excellent solvant (bonne dissolution) pour les composés polaires (hydrophiles)

Les composés non polaires ne se dissolvent pas dans l'eau mais dans des solvants organiques comme le chloroforme (hydrophobe)

6.1. La solvation = dissolution de molécules hydrophiles dans H₂O

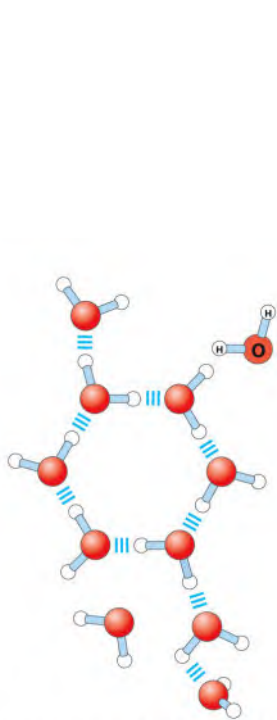


La **solvation** résulte de l'établissement de **liaisons électrostatiques** entre les molécules d'eau et les ions (composés chargés: **Na⁺**, **Cl⁻**, **COO⁻**, **NH₃⁺**, **PO₄³⁻**...) et de liaisons hydrogène entre les molécules d'eau de cette "couche" dite de solvation.

Le nombre moyen de molécules d'eau de la couche de solvation dépend de la charge de l'ion et de son rayon atomique:

plus l'ion est chargé plus il attire les molécules d'eau; et à charge égale, plus un ion a un rayon ionique important, moins il attire de molécules d'eau.

6.2. L'effet hydrophobe

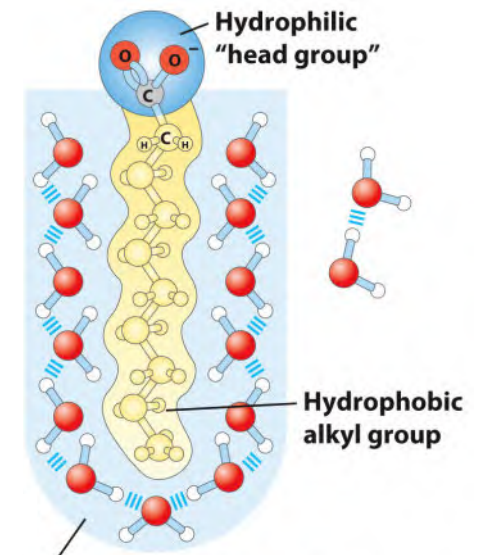


"Flickering clusters" of H₂O molecules in bulk phase

Une molécule **apolaires** (exemple : lipide, aa aromatique ou aliphatique) qui ne possède pas de charges ou de d'atomes capables de former des liaisons hydrogènes est solubilisée dans l'eau.

Il en résulte que **l'ordre des molécules d'eau** avant l'ajout de la molécule apolaire **augmente** lorsque cette molécule est ajouté à l'eau et du coup **l'entropie diminue**.

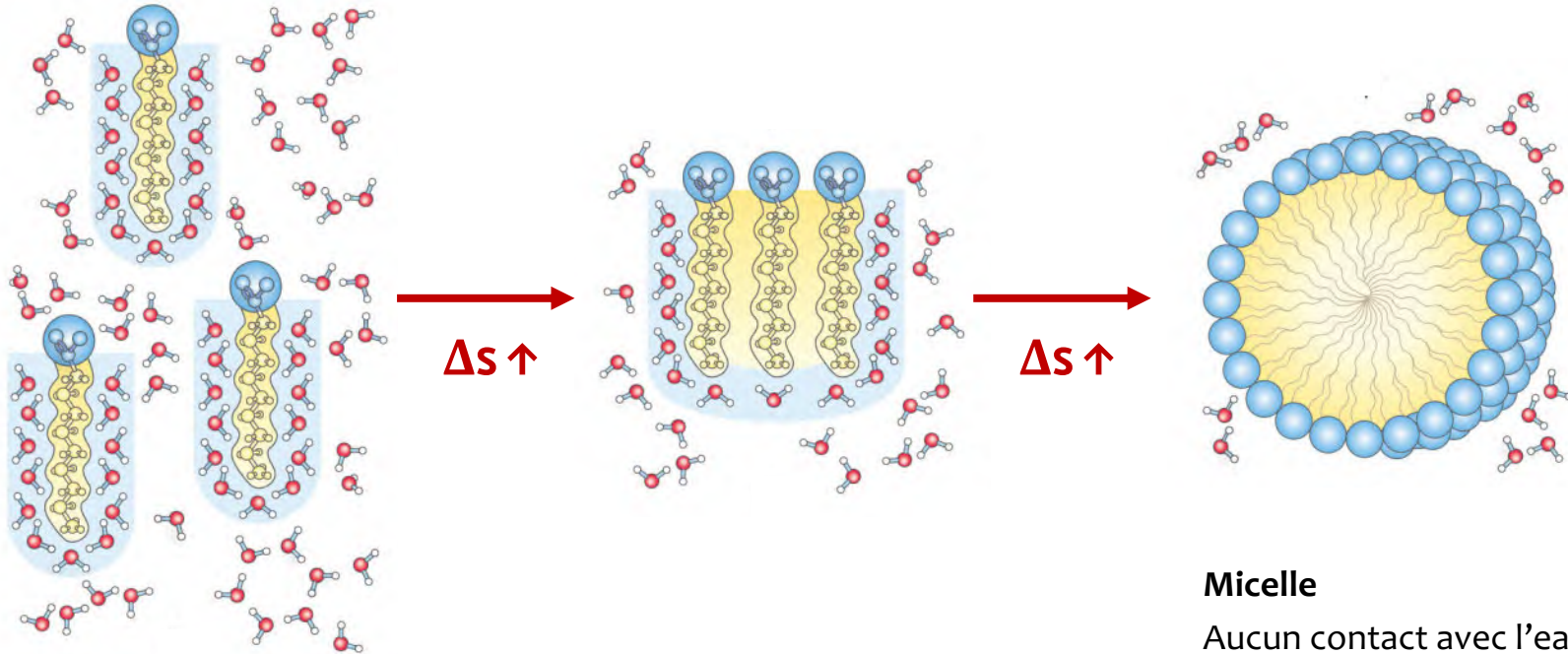
Une faible entropie est thermodynamiquement défavorable, donc les solutes hydrophobes ont une faible solubilité.



Highly ordered H₂O molecules form "cages" around the hydrophobic alkyl chains.

6.3. L'effet hydrophobe

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S$$



Les molécules hydrophobes et apolaires (aliphatiques, aromatiques) ont la propriété d'empêcher la formation des liaisons hydrogène entre les molécules d'eau.

Les molécules d'eau engagées dans ces zones sont attirées vers l'extérieur par les liaisons qui les unissent aux autres molécules d'eau. La force qui en résulte, tendant à réunir les molécules d'eau entre elles, va réduire au minimum possible les surfaces entre l'eau et les zones hydrophobes de la molécule.

Pour obtenir la plus petite surface de contact, les radicaux hydrophobes sont repoussés les uns contre les autres, comme s'ils étaient unis : on dit qu'ils sont liés par des liaisons hydrophobes. En fait ces liaisons n'existent pas elles résultent seulement de la force qui unit les molécules d'eau qui environnent ces molécules hydrophobes

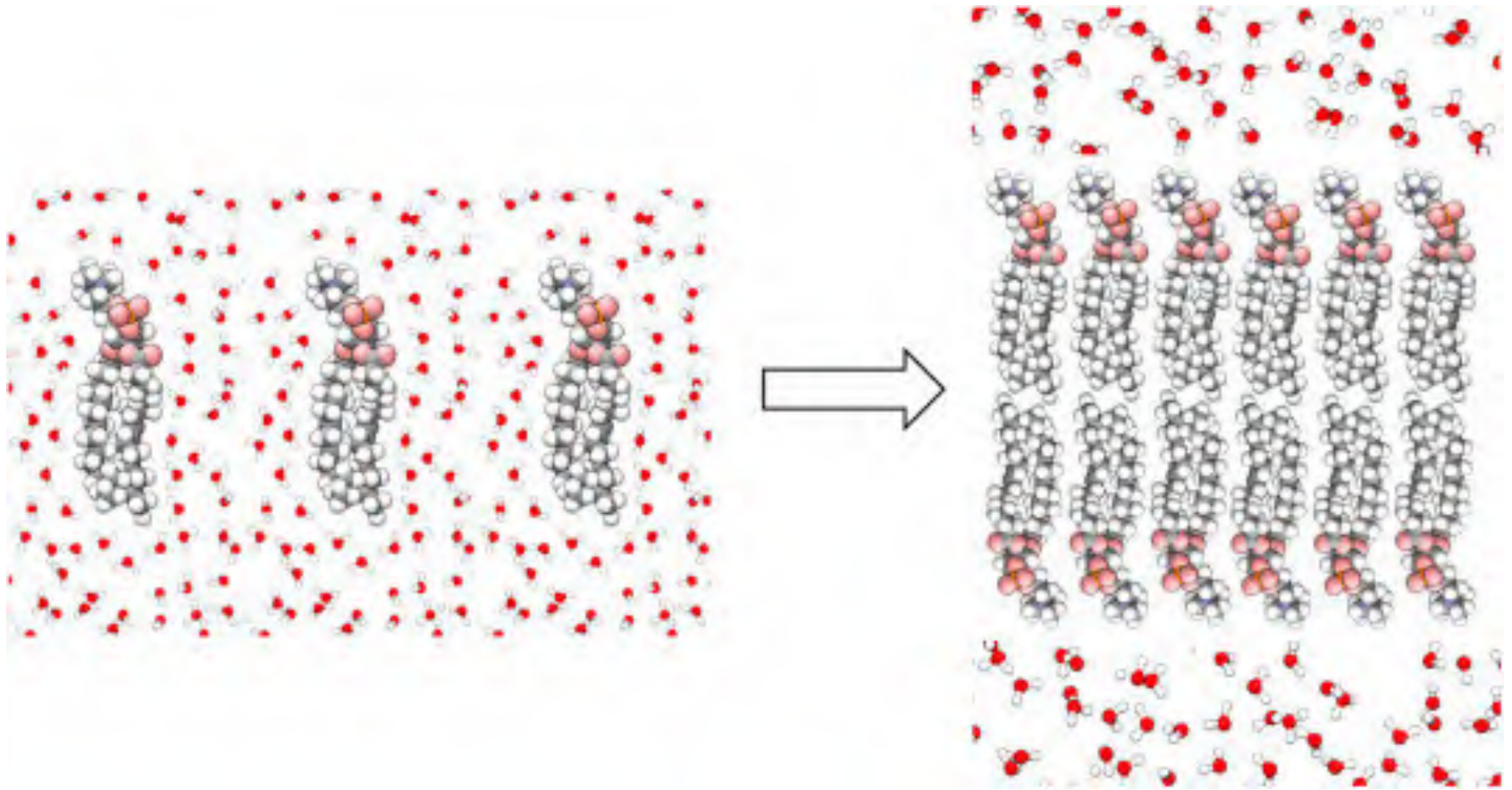
Micelle

Aucun contact avec l'eau.

- Réduction de la surface exposée au solvant polaire (ici H_2O)
- Le nombre de molécules d'eau ordonnées est minimisé = L'entropie est encore augmentée

6.3. L'effet hydrophobe

Formation des bicouches lipidiques



6.3. L'effet hydrophobe

- L'**effet hydrophobe** (aussi appelé **interactions hydrophobes**) s'établit entre deux groupements **apolaires**.
- La force de ces interactions n'est pas due à une attraction entre les régions non polaires des molécules.
- Une fois assemblées en amas, les molécules hydrophobes sont **maintenues** ensemble par les interactions de **Van der Waals**.
- Le système résulte en une **meilleure stabilité thermodynamique** (minimisation du nombre de molécules d'eau requises pour entourer les portions hydrophobes des molécules et augmentation de l'entropie).
- Cet effet hydrophobe est en partie responsable du **repliement des protéines** sur elles-mêmes (structure 3D) en milieu aqueux.

Pas d'eau (ou de milieu polaire), pas d'effet hydrophobe !

6.3. L'effet hydrophobe

- ♦ Les **sites** de liaison des enzymes et des récepteurs sont souvent **hydrophobes**.
- ♦ Ces sites lient des **substrats et ligands hydrophobes**, remplaçant les molécules d'eau et augmentant l'entropie du système.

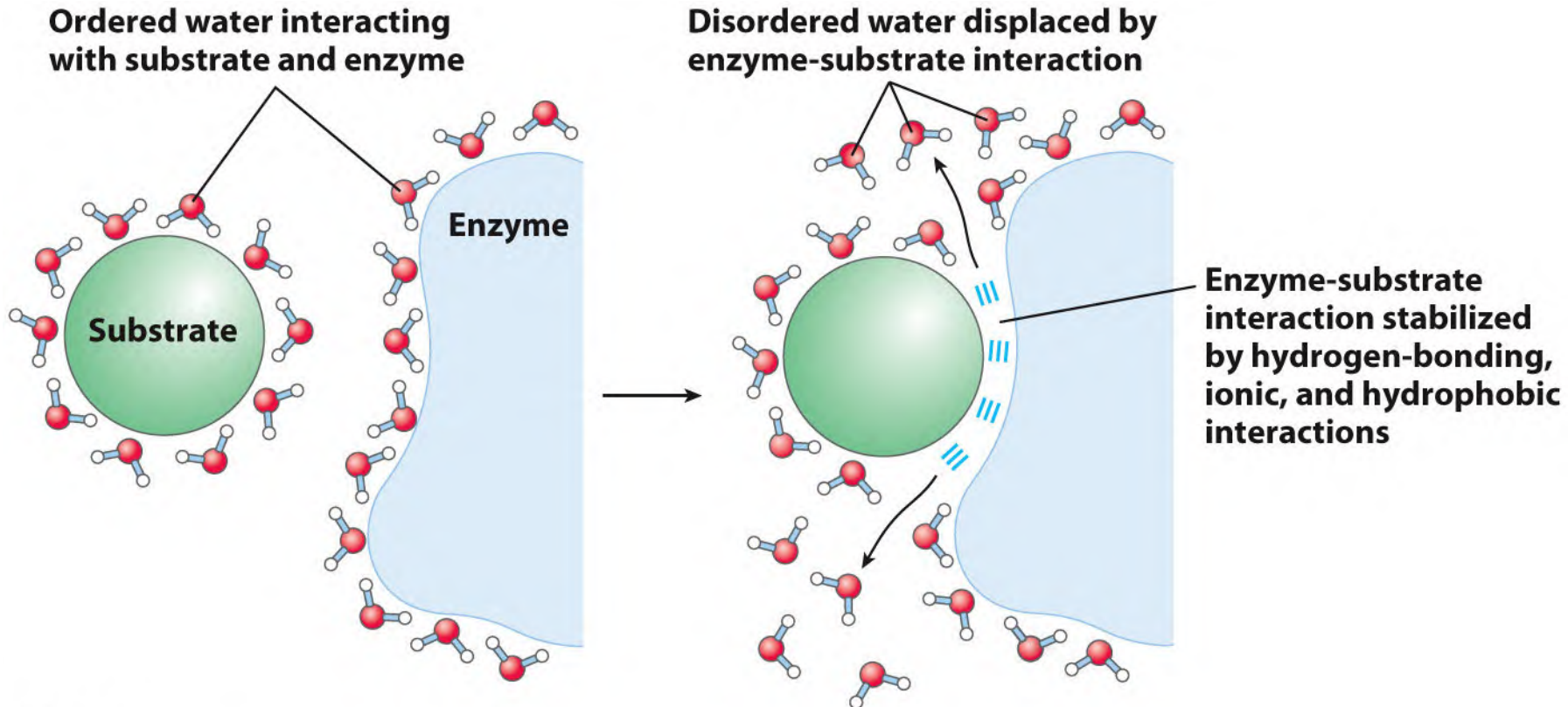


Figure 2-8

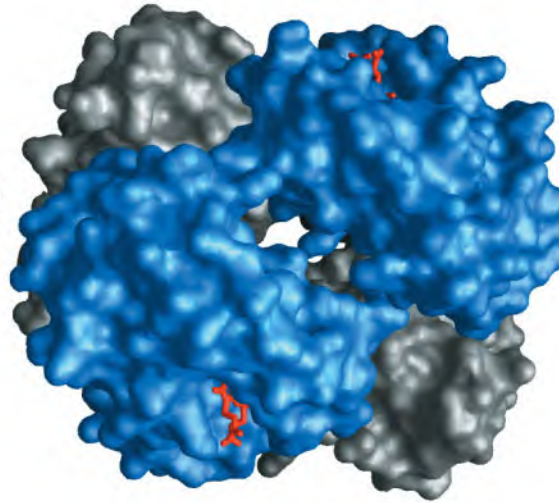
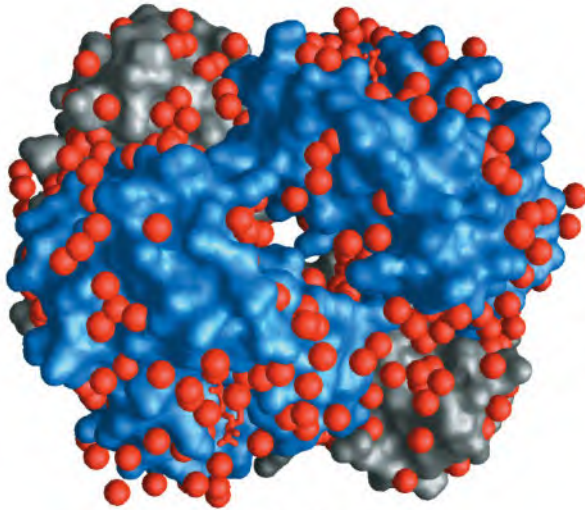
Lehninger Principles of Biochemistry, Seventh Edition

© 2017 W. H. Freeman and Company

7. L'eau liée est essentielle à la fonction des protéine/enzymes

Hémoglobine avec H₂O liée

Hémoglobine sans H₂O liée



(a)

(b)

Figure 2-9
Lehninger Principles of Biochemistry, Seventh Edition
© 2017 W. H. Freeman and Company

Site actif de la L-arabinose-binding protein

5 H₂O sont impliquées dans le positionnement et lialiaison du L-ara

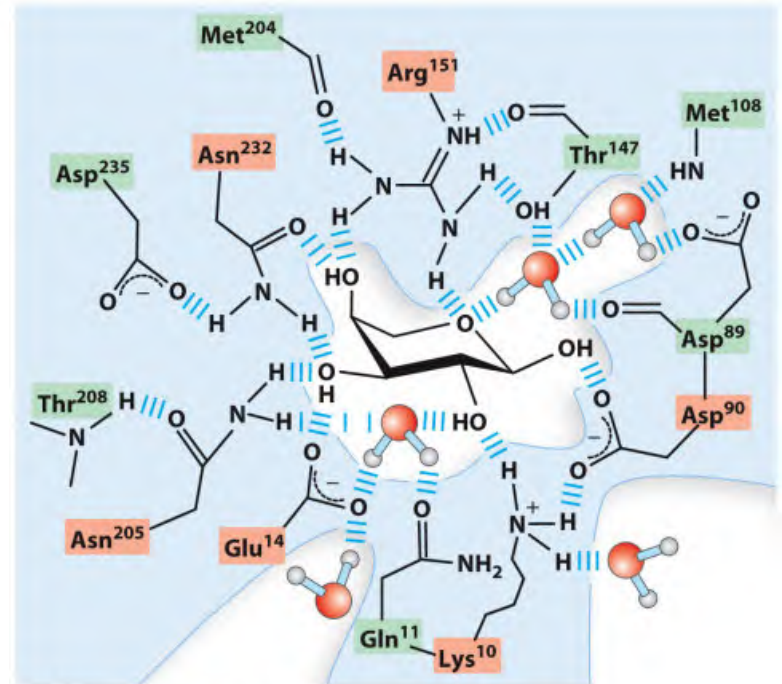
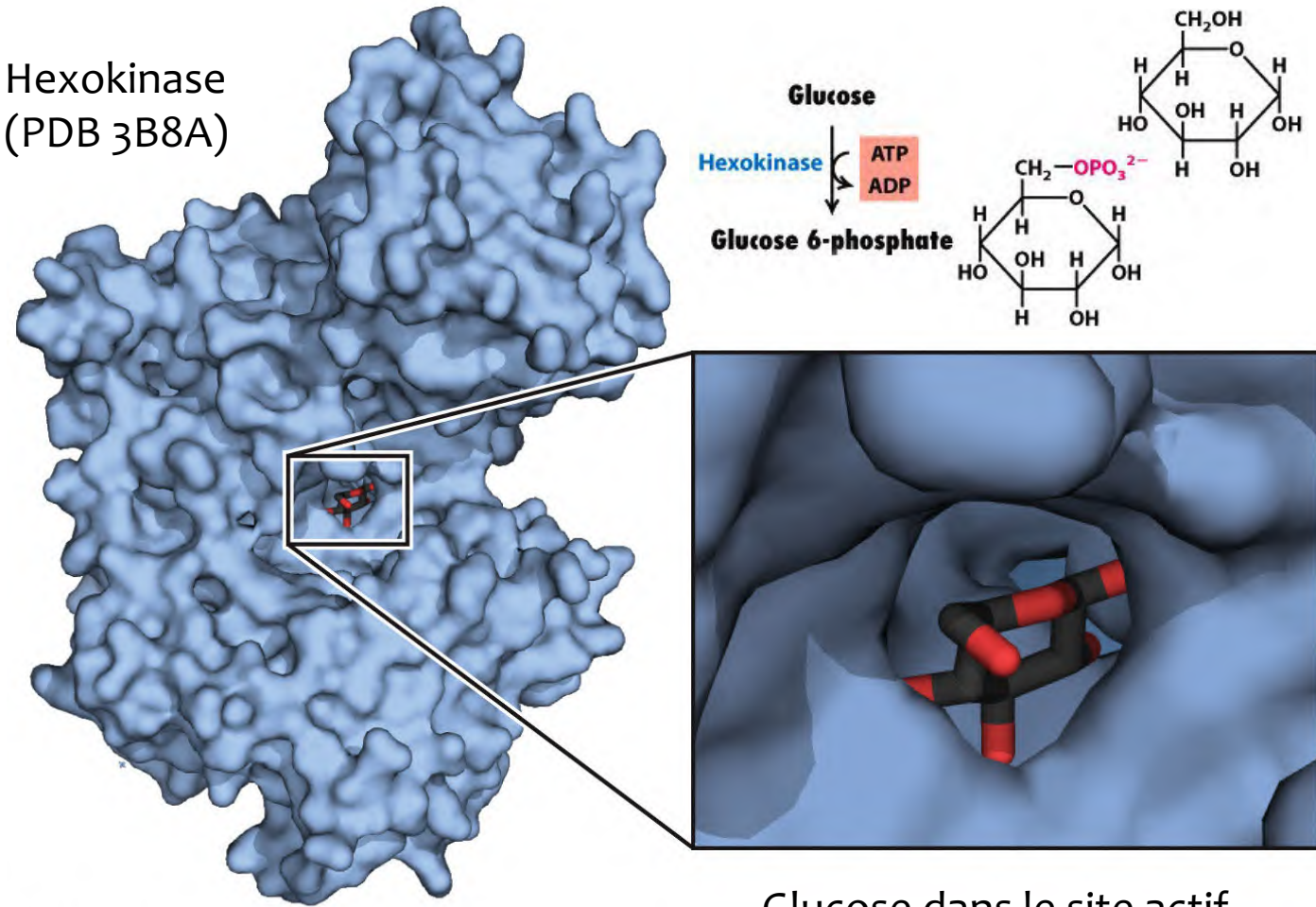


Figure 2-11
Lehninger Principles of Biochemistry, Seventh Edition
© 2017 W. H. Freeman and Company

Les interactions dans la reconnaissance Enzyme-substrat



Glucose dans le site actif

Figure 1-24
Lehninger Principles of Biochemistry, Seventh Edition
© 2017 W. H. Freeman and Company