

УДК 373.5

ПРАКТИЧНА РОБОТА «МОДЕЛЮВАННЯ ПРОСТОРОВОЇ СТРУКТУРИ БІОМОЛЕКУЛ»

Олександр КОЗЛЕНКО, науковий співробітник лабораторії хімічної і біологічної освіти Інституту педагогіки НАПН України

Анотація. Запропоновано розробку практичної роботи згідно з програмою з біології для профільного рівня з використанням комп'ютерних і саморобних моделей молекул білків і нуклеїнових кислот.

Ключові слова: моделювання, візуалізація молекул, практична робота, біополімери.

Олександр КОЗЛЕНКО

Практическая работа «Моделирование пространственной структуры биомолекул»

Аннотация. Предложена разработка практической работы в соответствии с программой по биологии для профильного уровня с использованием компьютерных и самодельных моделей молекул белков и нуклеиновых кислот.

Ключевые слова: моделирование, визуализация молекул, практическая работа, биополимеры.

Oleksandr KOZLENKO

The Practical Work «Modeling of the Spatial Structure of Biomolecules»

Summary. The practical work due to the program of biology of profile-level school teaching with the using of computer models and home-made models of molecules, proteins and nucleic acids is proposed.

Keywords: modeling, visualization of molecules, practical work, biopolymers.

Наявність персональних комп'ютерів, підключених до Інтернету, в предметному кабінеті – це, беззаперечно, чудове доповнення до традиційних ТЗН. Проте їх використання на уроці часто перетворюється на непросту методичну (а іноді й морально-етичну) проблему – навіть під час групової роботи неможливо посадити за учнівський комп'ютер більш ніж три-чотири учні. Пропонуємо розробку практичної роботи, в якій ця проблема перетворюється на спосіб організації заняття.

На прикладі практичної роботи з біології для профільного рівня «Моделювання просторової структури біомолекул» покажемо, як цю проблему можна не тільки зневілювати, а й використати з максимальною ефективністю (окремі елементи цієї практичної роботи можна використати для академічного рівня чи навіть рівня стандарту).

Для виконання практичної роботи клас поділяють на групи. Формуються шість базових груп (але можна зробити і більше, якщо дати однакове завдання декільком групам). Групові завдання за складністю та вимогами дещо відрізняються від завдань для рівня внутрішньогрупової взаємодії, тож

спосіб формування груп варто обрати заздалегідь. Частина завдань вимагає ефективного об'єднання зусиль членів групи (як нині кажуть, *тімбілдінг*^{*}), тому можна використовувати роботу для розвитку комунікативних компетенцій окремих учнів. Кращим способом формування груп, на думку автора, є вибір лідерів: першим за рейтингом учням надається право набрати собі групи (зазвичай це робиться так: шість перших за рейтингом учнів виходять до дошки і по черзі викликають до себе в групу одного з присутніх у класі); цей спосіб забезпечує відносну рівність груп за силою і достатньо високу сумісність у групах. Членам груп дозволяється підходити до інших команд, дивитися, що вони роблять, і навіть приєднуватися до інших груп під час виконання завдань: для відповіді на підсумкове запитання необхідно якісно зробити всі шість моделей і обговорити запитання.

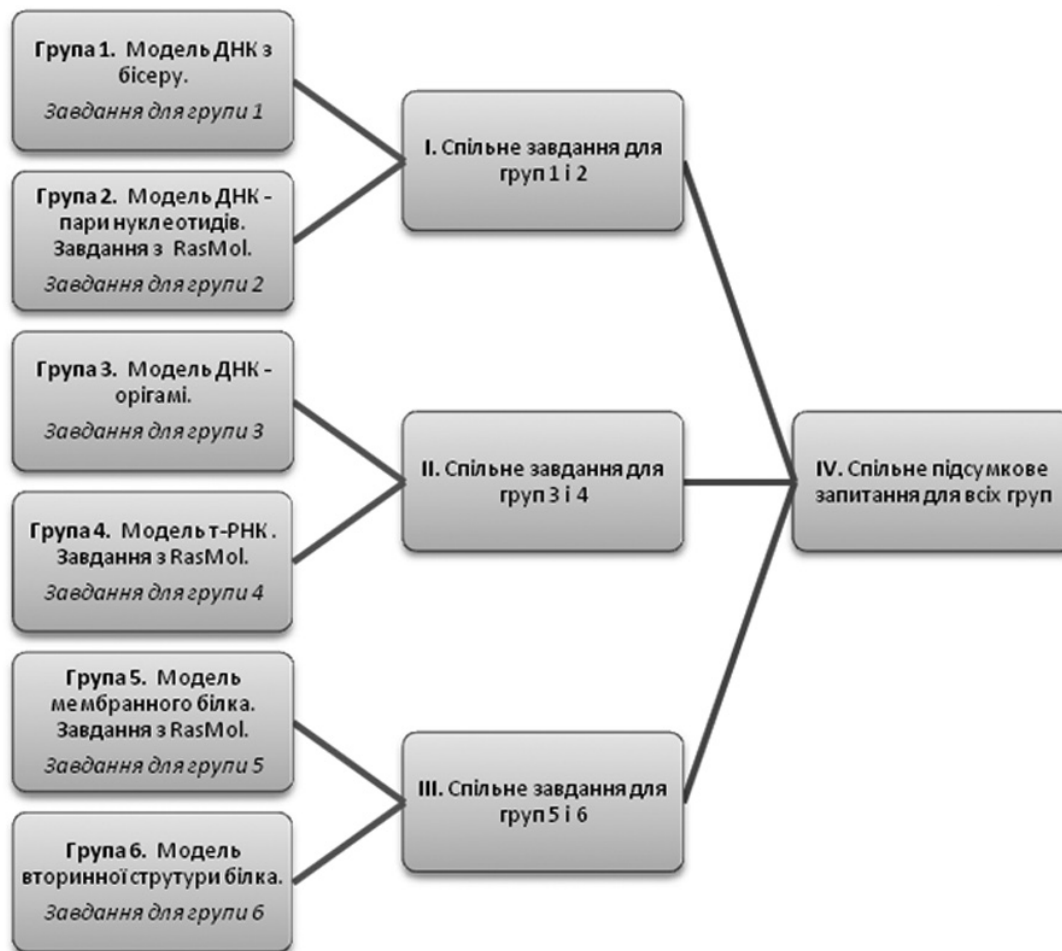
Кожна група отримує матеріали й інструкції для роботи та завдання, відповіді на які записують у зошитах або спеціальних бланках, а в кінці роботи зачитують їх. Розподіл завдань наведено на схемі 1.

Для роботи потрібно три комп'ютери. За наявності тільки одного вчительського комп'ютера мож-

© Козленко О. Г., 2012

* Від англ. *teambuilding* – створення команди.

Послідовність завдань для груп



на поділити «комп'ютерний час» таким чином, щоб перші 5–7 хв працювала група 2, наступні 7–10 хв – група 4, а потім доступ мала група 5.

Роботу можна виконувати як в режимі офлайн (off-line) (з використанням візуалізатора молекул RasMol і заздалегідь підготовлених моделей, розміщених на диску), так і в режимі онлайн (при цьому можна використовувати додаткові ресурси Інтернету – сторінки «Молекула місяця» сайту Міжнародного банку білкових структур PDB <http://www.rcsb.org/pdb/home/home.do>, а також візуалізатор молекул Jmol, який є внутрішнім візуалізатором молекул сайту PDB). У разі роботи офлайн можна попередньо підготувати інструкції на основі матеріалів таких сторінок.

- Пам'ятка для роботи з RasMol: <http://www.kozlenkoa.narod.ru/nb1.htm>.

- Пам'ятка для роботи з командним вікном: <http://www.kozlenkoa.narod.ru/nb2.htm>.

- Пам'ятка для роботи із сайтом Банку білкових структур PDB: <http://www.kozlenkoa.narod.ru/pdb.htm>.

Для підбиття підсумків роботи використовують ті форми рефлексії, що їх прийнято в конкрет-

ного вчителя. Оцінюючи роботи після уроку (в ідеалі – під час самого уроку, але можна і після), вчителю важливо звернути увагу на правильність власне моделювання, наприклад правильний порядок нуклеотидів у моделі групи 2. Це входить до підсумкової оцінки.

Комплекти для підготовки паперових матеріалів у електронному вигляді можна скачати на сторінці: <http://www.kozlenkoa.narod.ru/soft.htm> (RAR-архів, 19,6 Мб).

Завдання для груп**1. ДНК: Бісерна модель**

Автор ідеї та реалізації – Соня Стіфел (Sonja Stiefel), 2008 р., Альбукерке, Нью-Мексико, США. <http://www.stiefelhome.com/>



Виконання практичної роботи в 10-Б класі Великодимерського НВК (Броварський район, Київська область) під керівництвом учителя біології *Олени Михайлівни Шелудченко*



Підготовчі роботи: роздрукувати на кольоровому або чорно-білому принтері схему складання моделі ДНК з бісеру (1 сторінка формату А4 – файл dna_jewelry_ua.ppt); підготувати бісер 6 кольорів: обов'язково чорний і помаранчевий, решта 4 кольори – за наявності.

Матеріали для роботи на уроці: ножиці, бісер, дріт для бісеру.

1.1. Чому ми використовуємо дві намистини для зображення **A** і **G** та лише одну – для **C** і **T**? Що являє собою дріт?

1.2. **A** може утворювати пару лише з **T** і **C** – пари тільки з **G**. В який спосіб це може показати на бісерній моделі?

1.3. * Як показати 3' і 5'-кінці ланцюгів ДНК?

2. ДНК: модель пар нуклеотидів



Ідея – Ван Ренсселер Поттер (Van Rensselaer Potter), 1958 р., Медисон, Вісконсин, США; адаптація – Чонг Кам Ху (Cheong Kam Khaw), Сінгапурський науковий центр, Сінгапур, і О. Г. Козленко.

<http://www.ncbe.reading.ac.uk/DNA50/cutout.html>

Підготовчі роботи: роздрукувати на кольоровому або чорно-білому принтері по 3 примірники кожної пари нуклеотидів (6 сторінок формату А4 – файл dna_atgc.doc).

Матеріали для роботи на уроці: ножиці, скріпки або клей, дріт або голка з товстою ниткою.

Пари основ треба вирізати і склеїти / з'єднати скріпками між собою.

2.1. Виконайте моделювання ділянки ДНК певної послідовності:

3'	A	G	G	C	C	T	T	A	G	A	3'
5'											5'

2.2. Розгляньте модель ДНК (PDB ID 1bna) в RasMol (або в Jmol на сайті PDB <http://www.rcsb.org/pdb/101/motm.do?momID=23>). Запишіть послідовність нуклеотидів цього фрагмента (зручно застосувати поєднання способів фарбування моделі Color - Shapely).

3'											5'
5'											3'

Спільне завдання I. Порівняйте обидві моделі з моделлю ДНК (PDB ID 1bna) в RasMol. Яка модель повніше відповідає структурі реальної молекули ДНК – бісерна чи паперова? В яких випадках і чим краще одна, в яких – інша?

3. ДНК: паперова модель орігамі

Автор – Токи Йен (Thoki Yen, 1985; опублікована в журналі Trends in Biochemical Sciences, Volume 20, page 94., 1995, № 2); версія – Девід Гудселл (David S. Goodsell), Ла Джола, Каліфорнія, США.



Підготовчі роботи: роздрукувати на кольоровому або чорно-білому принтері схему складання та модель ДНК (2 сторінки формату А4 – файл dna-3dmodel-paper.pdf; за бажання модель можна збільшити до 2 сторінок А4, файли dna_1.jpg і dna_2.jpg). Для порівняння можна роздрукувати простішу модель для складання з файла dna_ori.pdf.

Матеріали для роботи на уроці: ножиці.

Роздрукувати, обрізати поля, зігнути навпіл, прогнути по суцільних лініях від себе («гора»), по пунктирних до себе («долина»). Модель сама згорнеться в спіраль, залишиться тільки трохи стиснути. У моделі якраз трохи більше від одного витка (11 пар нуклеотидів).

Зберіть модель молекули ДНК за схемою.

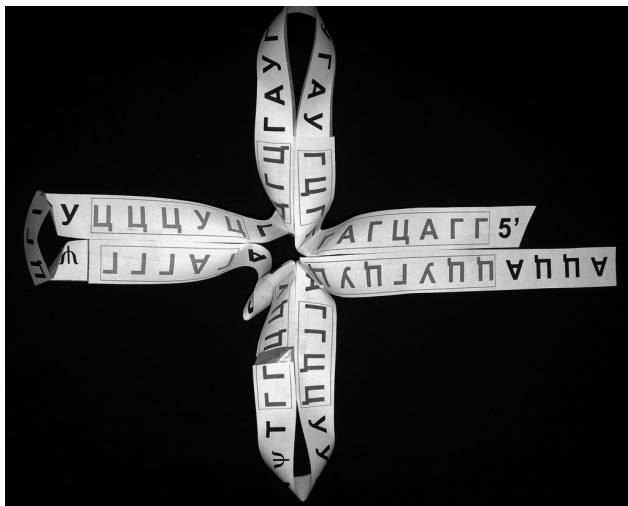
3.1. Запишіть послідовність нуклеотидів цієї молекули в форматі:

3'													5'
5'													3'



3.2. * Для Ночі науки в Белграді, Сербія, 21 вересня 2011 зібрали найдовшу модель молекули ДНК – завдовжки 247,44 м (<http://www.nocistrzivaca.rs/beograd/001.html>). Оцініть за знімком, зі скількох тисяч пар нуклеотидів (kb – kilobase) вона складається (приблизно).

4. т-РНК



Ідея та реалізація – Козленко О. Г., 2008. <http://www.kozlenkoa.narod.ru/photoalbum.htm>

Підготовчі роботи: роздрукувати на кольоровому або чорно-білому принтері стрічку з послідовністю нуклеотидів т-РНК (якщо друкувати на чорно-білому принтері, то паліндромні ділянки, треба зафарбувати кольоровими олівцями; 2 сторінки формату А4 – файл tna.doc).

Матеріали для роботи на уроці: ножиці, липка стрічка і лейкопластир.

Первинна і вторинна структури транспортної РНК добре відомі. Найвні в первинній структурі паліндромні послідовності нуклеотидів і непа- ліндромні ділянки зумовлюють вторинну струк- туру тРНК: з'єднуючись за принципом компле- ментарності, вони утворюють дволанцюжкові ділянки і є «черешками» «трилисника».

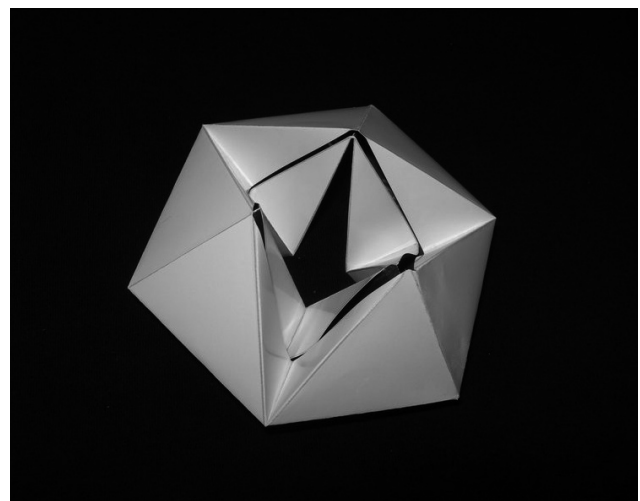
4.1. Склейте за допомогою прозорої липкої стрічки вторинну структуру т-РНК.

4.2. Розгляньте модель т-РНК (PDB ID 4tna) в RasMol (або в Jmol на сайті PDB <http://www.rcsb.org/pdb/101/motm.do?momID=15>). Спробуйте зібрати третинну структуру т-РНК у вигляді літери «Г» (зручно застосувати для відображення молекули у візуалізаторі поєднання способів фарбування моделі Color - Group).

4.3.* Яку амінокислоту переносить т-РНК, модель якої розміщується в PDB за ID 4tna?

Спільне завдання II. Яка модель повніше від- повідає структурі нуклеїнових кислот – модель орігами ДНК або модель т-РНК зі стрічки? В яких випадках зручніше користуватися першою, в яких – другою?

5. Мембранний білок



Автор моделі – Томоко Фузе (Tomoko Fuse; «Тетраедри, що обертаються», кн. Тоши Така- хама і Куніхіко Касахара «Орігами для знавців». – Japan Publications, Inc., «ALSIO», 1987), адап- тація – Козленко О. Г., 2005.

Підготовчі роботи: роздрукувати на кольоровому або чорно-білому принтері розгортку моделі білка та інструкцію зі складання (2 сторінки формату A4 - файли membran_prot_ua.doc і membran_prot.gif; доцільно роздрукувати 2-3 примірники розгортки).

Матеріали для роботи на уроці: ножиці, клей.

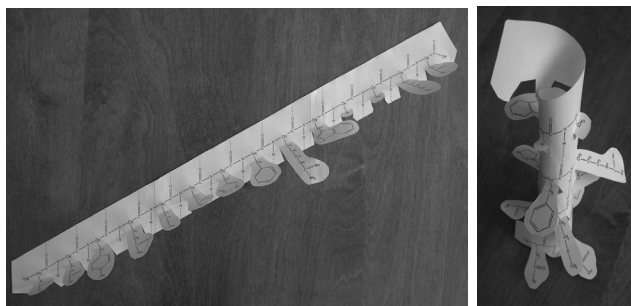
Зберіть модель мембранного білка за інструкцією.

5.1. Якою структурою білка (первинною, вторинною, третинною, четвертинною) є модель?

5.2. Розгляньте модель Na⁺-K⁺-АТФази (PDB ID 2zxe) в RasMol (або в Jmol на сайті PDB <http://www.rcsb.org/pdb/101/motm.do?momID=118>). Знайдіть ділянку, розташовану безпосередньо в плазматичній мембрані (саме її з певною мірою умовності відображає паперова модель – див. відеофрагмент моделі Na⁺-K⁺-АТФазного насоса <http://www.youtube.com/watch?v=aQf0k2xqT7Q> або файл origami02.flv).

5.3.* Для дослідження структури білків широко застосовується метод рентгеноструктурного аналізу, який потребує попередньої кристалізації білка з водного розчину. Спробуйте на прикладі даного білка пояснити, чому структуру мембранних білків тривалий час не вдавалося вивчити за допомогою методу рентгеноструктурного аналізу. Підтвердіть свою відповідь на моделі.

6. Вторинна структура білка



Ідея та реалізація – Козленко О. Г., 2011.

<http://www.kozlenkoa.narod.ru/photoalbum.htm>

Підготовчі роботи: роздрукувати на кольоровому або чорно-білому принтері стрічку з послідовністю амінокислот (при друку з файлу **model_prot.gif** – 1 сторінка формату A4, з файлу програми **ChemDraw model_prot.cdx** – 3 сторінки формату A4; можна розрізати файл **model_prot.gif** у будь-якому графічному редакторі на 3 фрагменти – зі сторінки формату A4 дуже маленьку модель).

Матеріали для роботи на уроці: ножиці, липка стрічка.

Для цієї моделі треба вирізати послідовність амінокислот з відігнутими радикалами і за допомогою липкої стрічки «утворити» водневі зв'язки

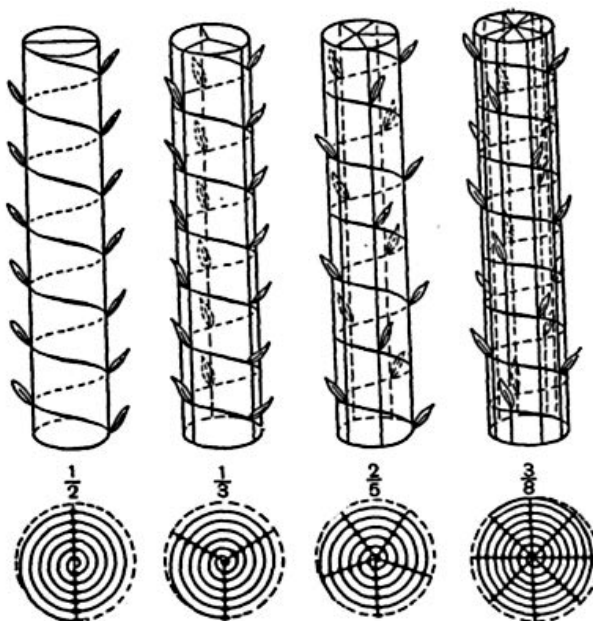
між атомами пептидних зв'язків різних рівнів так, щоб на виток спіралі припадало 3,6 амінокислотного залишка, і отримати α -спіраль.

6.1. Скільки однакових амінокислот міститься в цьому фрагменті білка?

6.2.* Прочитайте уривок з підручника ботаники «Спіральне листорозміщення».

Яким дробом можна висловити амінокислоторозташування в α -спіралі білка?

При **спіральному листорозміщенні** листки в насінних рослин розташовані не безладно, а в певному порядку, характерному для кожного виду рослин. Якщо подумки з'єднати лінією місця прикріплення листків, розташованих вгору безпосередньо один за іншим, поки не дійдемо до листка, який сидить над тим, з якого почали..., то ми отримуємо так звану **основу**, або **генетичну спіраль**; сукупність листків у ній, без останнього, що сидить на ...[одному витку спіралі], називається **листовим циклом**. Кут кола, на який відстоїть один листок від іншого, розташованого над ним чи під ним, називається кутом розбіжності. ...



Спіральне листорозміщення можна виразити дробом, у чисельнику якого ставлять число обертів по стеблу основної спіралі одного листового циклу, а в знаменнику – число листків у даному циклі...; разом з тим цей дріб вказуватиме і розбіжність між сусідніми листками, виражену в частках кола; відповідно можна визначити і кут розбіжності між сусідніми листками, виражений у градусах. У разі листорозміщення в $1/3$ основна спіраль робить один оберт по стеблу, листовий цикл складається з трьох листків, і кут розбіжності дорівнюватиме 120° ; у разі листорозташування в $2/5$ основна спіраль робить два оберти, листовий цикл складається з 5 листків, а кут розбіжності становить 144° .

(Ботаника: в 2 т. – Т. 1. – Анатомія и морфология: Для пед. ин-тов и ун-тов / Курсанов Л. И.,

Комарницький Н. А., Мейер К. И. и др. – 5-е изд., перераб. – М.: Просвещение, 1966. – 423 с. – С. 268.)

Спільне завдання III. На моделі мембранного білка (попереднє завдання) намалуйте контури (приблизно) створеної вами моделі вторинної структури білка.

Скористайтеся моделлю Na⁺-K⁺-АТФази (PDB ID 2zxe) в RasMol (або в Jmol на сайті PDB); зручно застосувати для відображення молекули у візуалізаторі поєднання способів фарбування моделі Color – Structure.

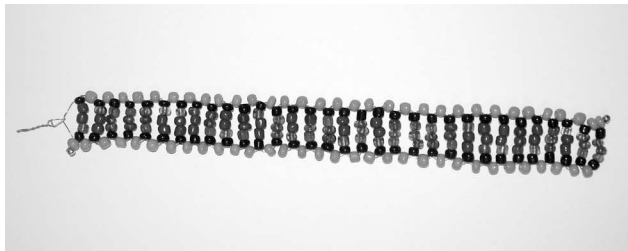
Спільне підсумкове завдання IV. Розташуйте всі зібрані моделі в порядку збільшення масштабу моделі.

Деякі розв'язки і коментарі.

1.3. На моделі 5' -кінці показано додатковими фосфатними групами:

2.2.

3'	Г	Ц	Г	Ц	Т	Т	А	А	Г	Ц	Г	Ц	3'
5'	Ц	Г	Ц	Г	А	А	Т	Т	Ц	Г	Ц	Г	5'



3.2. На фото (с. 26) видно, що одна пара нуклеотидів у моделі за шириною приблизно дорівнює трьом суглобам кисті дівчини, яка тримає модель на передньому плані. Вимірявши цю відстань (наприклад, її оцінено як 5 см), можна знайти загальну кількість тисяч пар нуклеотидів

у моделі: 24744 см : 5 см = 4949 ≈ 5 тис. пар нуклеотидів.

Конкретне число може бути іншим залежно від того, яку ширину буде обрано учнями за одиницю; важливою є правильність міркувань (а також заокруглення відповіді до тисяч пар нуклеотидів), а не збіг цифр.

4.3. Найпростіший спосіб відповісти на це питання – подивитися повну інформацію про молекулу, відкривши файл моделі молекули як текстовий (за допомогою програм Блокнот (Notepad) або WordPad чи Word). У третьому рядку вказано:

TITLE CRYSTALLOGRAPHIC REFINEMENT OF YEAST PHENYLALANINE TRANSFER

Тобто це т-РНК дріжджів, що переносить фенілаланін.

Цей спосіб роботи з файлами обговорений у *Пам'ятці для роботи з командним вікном програми RasMol*: <http://www.kozlenkoa.narod.ru/nb2.htm>

6.2. Формула листорозміщення показує, скільки листків припадає на 1 оберт спіралі. У нашому випадку перерахунок буде таким (пам'ятаємо, що відповідь треба представити у вигляді звичайного дробу):

3,6 залишка – 1 виток

1 залишок – x витків

$$x = \frac{1}{3,6} = \frac{10}{36} = \frac{5}{18}$$

Тобто два радикали амінокислот розміщуються точно один над іншим тільки через 5 витків, і на ці п'ять витків припадає 18 амінокислотних залишків.

Шановні читачі!

Не забудьте передплатити журнал
«БІОЛОГІЯ І ХІМІЯ В СУЧАСНІЙ ШКОЛІ»
 на 2012 рік.

Передплату можна здійснити
 на **1 місяць, 3 місяці і півроку.**

Оплату приймають усі поштові відділення
 до 10 числа місяця, що передує передплатному.

Передплатний індекс **74643**