

# BIOESPECTROSCOPIA

Curso 2009/2010

(Código: 2115108-)

## 1. PRESENTACIÓN

Las técnicas espectroscópicas incluyen:

1. irradiación de la muestra con alguna fuente de radiación electromagnética;
2. medida de la dispersión, absorción o emisión de radiación por la muestra, en función de diferentes parámetros, como por ejemplo intensidad de dispersión, coeficiente de absorción molar a una determinada longitud de onda, etc.; y
3. la interpretación de esos parámetros medidos para obtener información biológica útil. Esta última etapa requiere conocer los principios físicos básicos de la interacción. La información obtenida puede ser, a grandes rasgos, de tipo estructural, dinámica, energética y/o analítica.

Este curso se plantean el conocimiento de, en estos términos, cada una de las principales técnicas espectroscópicas, y su aplicación al estudio de biomoléculas y agregados biológicos.

## 2. CONTEXTUALIZACIÓN

Esta asignatura pretende enlazar los conocimientos adquiridos durante las enseñanzas de Grado en las disciplinas del área de Química-Física y Bioquímica, con el objetivo de capacitar en el entendimiento y utilización de determinadas técnicas para la resolución de problemas relacionados con sistemas de tipo biológico.

De forma más específica, el estudio de la interacción de la radiación con la materia y sus consecuencias han supuesto la clave de la elucidación estructural de átomos y moléculas. En este sentido las moléculas, macromoléculas y agregados que constituyen los seres vivos no son una excepción. Así pues, la finalidad principal perseguida es capacitar para el manejo de diferentes técnicas espectroscópicas, especialmente algunas de las más utilizadas en el estudio de sistemas biológicos, analizando los diferentes aspectos teóricos y prácticos de cada una de ellas y centrándonos en las posibilidades que ofrecen en el conocimiento de la estructura y dinámica de las biomoléculas.

## 3. REQUISITOS PREVIOS RECOMENDABLES

Es recomendable partir de unos conocimientos previos en Bioquímica, especialmente en lo que respecta a conocimiento básicos sobre la estructura y propiedades de las biomoléculas, y su relación con la función desempeñada en los sistemas biológicos. Por otra parte es deseable contar con una formación básica en Química Física, especialmente en el manejo de los conceptos básicos en métodos y técnicas espectroscópicas.

## 4. RESULTADOS DE APRENDIZAJE

En general, la espectroscopía, como disciplina que se dedica al estudio de las interacciones de la radiación electromagnética con la materia, nos aporta gran variedad de información sobre los sistemas a estudiar. Nuestro interés en esta asignatura se centra en el análisis de los sistemas biológicos. Por tanto, nuestra finalidad es conocer qué información nos puede aportar la espectroscopía de estos sistemas. Para ello nos planteamos los siguientes objetivos:



1. Conocimiento de las propiedades que afectan y definen a la estructura y dinámica de las biomoléculas.
2. Conocimiento de los conceptos básicos de espectroscopía.
3. Conocimiento de los aspectos concretos de cada una de las técnicas espectroscópicas seleccionadas y su aplicación al estudio de biomoléculas y agregados biológicos
4. Conocimiento de las líneas de investigación abiertas actualmente en la espectroscopia de moléculas y sistemas biológicos, centrándonos en:
  - últimas reuniones científicas y congresos,
  - manejo de bases de datos y búsquedas bibliográficas.

## 5. CONTENIDOS DE LA ASIGNATURA

El curso está dividido en 3 bloques, una primera parte con carácter introductorio, un segundo bloque en el que se trabajan con los aspectos teóricos y prácticos de cada una de las técnicas así como con sus aplicaciones a sistemas biológicos y una última parte en la que se pretende mostrar cual es el estado actual en este campo. Cada uno de estos bloques queda por tanto estructurado de la siguiente manera:

### Bloque A. Introducción.

Como punto de partida se pretende revisar y profundizar en el conocimiento tanto de los sistemas con los que se va a trabajar como de los métodos y técnicas con los que se van a estudiar. Por tanto, en esta introducción trabajamos dos Unidades Didácticas:

#### Unidad A1. Biomoléculas.

Moléculas y macromoléculas. Configuración y conformación. Interacciones inter-, intramoleculares e interacciones con el medio. Conceptos de simetría. Estructura de proteínas y ácidos nucleicos.

#### Unidad A2. Conceptos fundamentales espectroscópicos.

Mecánica cuántica y espectroscopía. Radiación electromagnética e interacción con la materia. Aspectos prácticos de espectroscopía. Forma y anchura de las bandas espectrales.

### Bloque B. Diferentes técnicas espectroscópicas y su aplicación a sistemas biológicos.

Se estudiarán los aspectos particulares así como su aplicación a los sistemas biológicos de las principales técnicas espectroscópicas. Se han seleccionado las Resonancias Magnéticas (de Espín y Nuclear), Espectroscopias de Vibración (IR y Raman) y las Espectroscopias Ultravioleta-Visible, de Fluorescencia y la Difracción de rayos X por su especial importancia e interés en el estudio de las biomoléculas.

#### Unidad B1. Espectroscopias de Resonancia Magnética: Nuclear (RMN) y de Espín Electrónico (RSE).

Fundamentos de un experimento de Resonancia Magnética. Instrumentación y técnica. Parámetros que medimos en RMN. Principales técnicas en RMN. Aplicaciones biológicas de la RMN. Parámetros que medimos en RSE. Técnicas de RSE avanzadas. Aplicaciones biológicas de la RSE

#### Unidad B2. Espectroscopias de vibración: Infrarrojo (IR) y Raman.

Fundamentos: Modos de vibración. Instrumentación y técnica. Métodos matemáticos para el análisis de espectros. Aplicaciones al estudio de biomoléculas.

#### Unidad B3. Espectroscopia Ultravioleta-Visible (UV-Vis) y de Fluorescencia.

Espectrofotometría de absorción. Fundamentos. Instrumentación y técnica. Aplicaciones de la espectroscopia de absorción UV-Vis al estudio de moléculas biológicas. Espectroscopia de emisión. Fluorescencia y fosforescencia. Espectroscopia de fluorescencia. Instrumentación y técnica. Fenómenos que pueden afectar a la fluorescencia. Aplicación a moléculas biológicas.

#### Unidad B4. Difracción de Rayos X.

Cristales. Teoría: Ley de Bragg y condiciones de Laue. Determinación de la morfología de la celda unidad. Estructuras de macromoléculas mediante difracción de Rayos X.

### Bloque C. Actuales líneas de investigación en la espectroscopia de moléculas y sistemas biológicos.

Acercamiento a la investigación actual en este campo, para ello se le informará sobre las últimas reuniones científicas y congresos relacionados con esta área, así como se le presentarán diferentes fuentes de documentación sobre bibliografía



especializada, introduciéndosele en los rastreos bibliográficos y en la localización y trabajo con artículos científicos específicos.

## 6.EQUIPO DOCENTE

DATOS NO DISPONIBLES POR OBSOLESCENCIA

## 7.METODOLOGÍA

Se facilitarán diferentes fuentes bibliográficas para el trabajo en esta asignatura, diferenciando entre referencias básicas (bibliografía básica, BB) y referencias complementarias (bibliografía complementaria, BC), estas últimas pueden ser de interés, o bien para ampliar conocimientos o bien para revisar conceptos. En los apartados de Bibliografía se especifican cada una de estas fuentes.

El equipo docente detallará las referencias con las que se va a trabajar en cada unidad así como el desarrollo cronológico de ésta. También se incluirán referencias a Bibliografía Complementaria Específica, para el estudiante que desee profundizar en temas concretos. Durante el desarrollo del curso se utilizarán otras publicaciones en revistas especializadas que se consideren de interés.

## 8.BIBLIOGRAFÍA BÁSICA

Comentarios y anexos:

[BB1] Van Holde, K.E., Johnson, W.C. y Ho, P.S. (1ª ed. 1998, 2ª ed. 2006) "Principles of Physical Biochemistry", Prentice Hall, Upper Saddle River, Nueva Jersey.

[BB2] Campbell, I.D. y Dwek, R.A. (1984) "Biological Spectroscopy", Benjamín-Cummings Publishing Co., Menlo Park, CA.

[BB3] Banwell, C.N. (1994) "Fundamentals of Molecular Spectroscopy", 4ª ed. McGraw-Hill. Traducida al castellano la 3ª ed. por O. de la Cruz : "Fundamentos de Espectroscopia Molecular"; 3ª ed.; Ed. Castillo, Madrid (1977).

[BB4] National Center for Biotechnology Information, <http://www.ncbi.nlm.nih.gov/>

## 9.BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

Comentarios y anexos:

[BC1] Hammes G.G. (2005) "Spectroscopy for the Biological Sciences", John Wiley & Sons, Inc. Nueva Jersey.

[BC2] Bourne, P.E. y Weissig, H. (2003) "Structural Bioinformatics", John Wiley & Sons, Inc. Nueva Jersey.

[BC3] Requena, A. Zúñiga, J. (2004) "Espectroscopia", Pearson Prentice Hall, Madrid.

[BC4] Guillory, W.A. (1977) "Introduction to Molecular Structure and Spectroscopy", Allyn and Bacon.

[BC5] Hollas, J.M. (1996) (reimp.) "Modern Spectroscopy" 3ª ed. J. Wiley & Sons Ltd.

[BC6] Levine, I.N. (1980) "Espectroscopia Molecular" Ed AC; (1975) "Molecular Spectroscopy", John Wiley and Sons.

## 10.RECURSOS DE APOYO AL ESTUDIO



## 11.TUTORIZACIÓN Y SEGUIMIENTO

Durante el curso, el contacto con el equipo docente se realizará con una periodicidad mínima de aproximadamente 2 vez por mes, comunicándonos la evolución y los principales inconvenientes que se encuentren. Lógicamente, este contacto puede ser tan frecuente como considere oportuno y necesario y se realizará preferentemente mediante el correo electrónico o través del espacio virtual disponible para el curso.

También es posible utilizar el correo ordinario, con la siguiente dirección:

Facultad de Ciencias  
Senda del Rey nº 9, 28040-MADRID

El contacto personal y/o telefónico se realizará principalmente en el siguiente horario y teléfonos:

Martes, de 16 a 20 h.

Profesora:

Dra. D<sup>a</sup> Mercedes de la Fuente Rubio

Despacho S10    Tel: 91 398 7207

## 12.EVALUACIÓN DE LOS APRENDIZAJES

La evaluación de las competencias adquiridas por el alumno se realizarán en función de los siguientes trabajos:

- Informes/revisiones sobre cada una de las técnicas espectroscópicas estudiadas, correspondientes, por tanto, a cada una de las Unidades Didácticas B1, B2, B3 y B4. Se pide que en estos informes se realice una revisión general de cada una de las técnicas. Estas revisiones no deben ser muy extensas. Se valora especialmente la capacidad de síntesis y de diferenciación de los aspectos y conceptos esenciales, así como la capacidad de expresar cada uno de estos aspectos con vocabulario propio. Es importante reflejar, además de un breve fundamento teórico, los aspectos instrumentales (instrumentación actual, tipos y manipulación de muestras,...) etc., y, especialmente, las principales aplicaciones que conozca en cada caso al estudio de los sistemas biológicos. Estos cuatro informes constituyen el primer trabajo de la asignatura.
- Rastreo bibliográfico y manejo de documentación científica específica. Trabajando con bases de datos bibliográficas de libre acceso se pedirá que realicen un pequeño rastreo bibliográfico que muestre los últimas publicaciones sobre algunas de las líneas de investigación relacionadas con la Bioespectroscopía y que al alumno les resulte de especial interés. Entre las diferentes referencias localizadas se pide que el alumno seleccione cuatro de ellas y las comente brevemente.

## 13.COLABORADORES DOCENTES

Véase equipo docente.

