

BIOESPECTROSCOPIA

Curso 2013/2014

(Código: 2115108-)

1. PRESENTACIÓN

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. En concreto, 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 plantea el conocimiento de, en estos términos, algunas 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 de 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 entendimiento de lo que las diferentes técnicas espectroscópicas, especialmente algunas de las más utilizadas, pueden aportarnos en el conocimiento de los sistemas biológicos; todo ello a través del análisis de los diferentes aspectos teóricos y prácticos de cada una de ellas y centrándonos en las posibilidades que ofrecen en el estudio 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 básico 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. Durante el curso se trabaja con referencias bibliográficas en inglés, por lo que es conveniente manejar este idioma, al menos a nivel de comprensión escrita.



4.RESULTADOS DE APRENDIZAJE

Los resultados que se esperan alcanzar son:

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 las líneas de investigación abiertas actualmente en la espectroscopía de biomoléculas y sistemas biológicos, potenciando el manejo de bases de datos y búsquedas bibliográficas y la utilización de bibliografía actualizada.
4. Conocimiento de los aspectos concretos de cada una de las técnicas espectroscópicas seleccionadas y su aplicación al estudio de biomoléculas y agregados biológicos.

5.CONTENIDOS DE LA ASIGNATURA

El curso está dividido en dos bloques, una primera parte con carácter introductorio y preparatorio, y un segundo bloque, parte central del curso, en el que se trabajan los aspectos fundamentales de cada una de las técnicas y sus aplicaciones a sistemas biológicos. Cada uno de estos bloques queda estructurado de la siguiente manera:

Bloque A. Introducción y Conceptos Básicos

Como punto de partida se pretende revisar, de forma introductoria, los sistemas biológicos, por un lado, y los principios básicos de la espectroscopía, por otro. Introducimos en este mismo bloque aspectos básicos sobre las fuentes de documentación, manejo de la literatura científica y búsquedas bibliográficas, que nos resultará de utilidad a lo largo de todo el curso. Finalizaremos esta introducción trabajando los conceptos fundamentales sobre estructura de biomacromoléculas.

Tema 1. INTRODUCCIÓN

LAS CÉLULAS: MOLÉCULAS QUE LAS COMPONEN Y SUS FUNCIONES. Agua: el disolvente biológico. Los azúcares. Los lípidos. Aminoácidos y proteínas. Nucleótidos y ácidos nucleicos. ESPECTROSCOPIA: PRINCIPIOS BÁSICOS. La radiación electromagnética: longitud de onda, frecuencia, energía e intensidad. Interacción radiación-materia: transiciones energéticas cuantizadas. Intensidades en las transiciones. Espectrofotómetros.

Tema 2. UTILIZACIÓN DE LA INFORMACIÓN CIENTÍFICA

TEXTOS CIENTÍFICOS. La introducción. Materiales y métodos. Los resultados. La discusión. Referencias bibliográficas. BÚSQUEDAS BIBLIOGRÁFICAS: BASES DE DATOS. GESTIÓN DE REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS.

Tema 3. ESTRUCTURA DE BIOMOLÉCULAS

NIVELES ESTRUCTURALES EN MACROMOLÉCULAS. CONFIGURACIÓN Y CONFORMACIÓN. INTERACCIONES MOLECULARES EN ESTRUCTURAS MACROMOLECULARES. Interacciones débiles. Interacción de moléculas con agua. Ambientes no acuosos de moléculas biológicas. CONCEPTOS DE SIMETRÍA. ESTRUCTURA DE PROTEÍNAS. Componentes de las proteínas: los aminoácidos. Estructura primaria de proteínas: el enlace



peptídico. Estructura secundaria de las proteínas: representaciones de Ramachandran. Estructuras supersecundarias y terciarias. Estructura cuaternaria en proteínas. ACIDOS NUCLEICOS. Bases nitrogenadas. Nucleósidos: Conformación del azúcar y la base nitrogenada. Nucleótidos: conformación de la cadena exocíclica azúcar-fosfato. Estructura primaria de los ácidos nucleicos: secuencia de nucleótidos. Estructura secundaria en el ADN y en el ARN. Estructuras de mayor orden en ácidos nucleicos.

Bloque B. 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), Espectroscopías de Vibración (IR y Raman) y las Espectroscopías Ultravioleta-Visible y de Fluorescencia, por su especial importancia e interés en el estudio de las biomoléculas.

Unidad B1. Espectroscopía Ultravioleta-Visible (UV-Vis) y de Fluorescencia

Tema 4. ESPECTROSCOPIA DE ABSORCIÓN ULTRAVIOLETA-VISIBLE

INTRODUCCIÓN. FUNDAMENTOS DE LA ESPECTROSCOPIA UV-Vis. REGLAS DE SELECCIÓN EN UV-Vis. MOLÉCULAS POLIATÓMICAS: BANDAS DE ABSORCIÓN DE CROMÓFOROS. Absorción en moléculas orgánicas. Absorción en complejos de metales de transición. Absorción en complejos de transferencia de carga. ASPECTOS PRÁCTICOS E INSTRUMENTALES. Aplicaciones de la ley de Lambert-Beer. APLICACIONES DE LA ESPECTROSCOPIA DE ABSORCIÓN UV-VIS A BIOMOLÉCULAS. Espectro Ultravioleta de Proteínas. Grupos prostéticos. Espectro Ultravioleta de Ácidos nucleicos. DICROÍSMO LINEAL Y CIRCULAR.

Tema 5. ESPECTROSCOPIA DE FLUORESCENCIA

INTRODUCCIÓN. FUNDAMENTOS DE LA ESPECTROSCOPIA MOLECULAR DE FLUORESCENCIA. Desactivación del estado excitado. Rendimiento cuántico de la fluorescencia. Decaimiento de la fluorescencia, vida media y probabilidad de transición. ESPECTROS DE EMISIÓN Y DE EXCITACIÓN. FLUORÓFOROS DE INTERÉS BIOLÓGICO. APLICACIONES DE LA ESPECTROSCOPIA DE FLUORESCENCIA. Efectos del medio sobre la posición de las bandas de fluorescencia y el rendimiento cuántico. Polarización de la fluorescencia. Desactivación o quenching de la fluorescencia. Transferencia de excitación.

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

TEMA 6. ESPECTROSCOPIA DE INFRARROJO

INTRODUCCIÓN. FUNDAMENTOS DE UN EXPERIMENTO DE ESPECTROSCOPIA INFRARROJA (IR). Vibraciones moleculares: El modelo del oscilador armónico simple. Grados de libertad de los átomos y modos de vibración. Dipolos eléctricos, momento dipolar e interacciones con otros campos eléctricos en moléculas vibrando. Transiciones entre niveles de energía vibracional. LOS ESPECTROS IR. Modos normales de vibración y bandas fundamentales. Otras bandas que podemos encontrar en un espectro IR. ANÁLISIS DE LOS ESPECTROS IR. Posición de las bandas y frecuencias de grupos. Intensidad. Anchuras de las bandas IR. ASPECTOS PRÁCTICOS E INSTRUMENTALES. Instrumentación. Manipulación de espectros. APLICACIONES DE LA ESPECTROSCOPIA IR A BIOMOLÉCULAS Y AGREGADOS MOLECULARES. Enlace de Hidrógeno. Espectros IR de proteínas. Espectros IR de ácidos nucleicos.



TEMA 7. ESPECTROSCOPIA RAMAN

INTRODUCCIÓN. FUNDAMENTOS DEL EFECTO RAMAN. REGLAS DE SELECCIÓN EN RAMAN, COMPARACIÓN CON IR. ASPECTOS PRÁCTICOS E INSTRUMENTALES. Importancia del láser en espectroscopía Raman. El espectro Raman: parámetros. APLICACIONES DE LA ESPECTROSCOPIA RAMAN AL ESTUDIO DE BIOMOLÉCULAS. Resonancia Raman (RR). Surface Enhance Raman Scattering (SERS). Coherent Anti-Stoke Raman Spectroscopy (CARS). Microscopía Raman. Espectroscopía Raman resuelta en el tiempo. Actividad óptica Raman.

Unidad B3. Espectroscopías de Resonancia Magnética: Nuclear (RMN) y de Espín Electrónico (RSE)

TEMA 8. ESPECTROSCOPIA DE RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR

INTRODUCCIÓN. FUNDAMENTOS DE UN EXPERIMENTO DE RMN. REVISIÓN DE CONCEPTOS BÁSICOS. Momento magnético y espín nuclear. Magnetización macroscópica. Transiciones energéticas en RMN. Resonancia y frecuencia de Larmor. EL ESPECTRO RMN. Área o intensidad de la señal. Constantes de acoplamiento y ecuación de Karplus. Efecto Nuclear Overhauser (NOE). Tiempos de relajación (T1 y T2). PRINCIPALES MÉTODOS EN RMN. Principales técnicas multidimensionales: espectros COSY y NOESY. Otros métodos en RMN. APLICACIONES DE RMN AL ESTUDIO DE MOLÉCULAS BIOLÓGICAS. Determinación de la estructura de macromoléculas. Estudio de interacciones entre moléculas mediante RMN.

TEMA 9. RESONANCIA DE ESPÍN ELECTRÓNICO

INTRODUCCIÓN. FUNDAMENTOS DE UN EXPERIMENTO DE EPR, REVISIÓN DE CONCEPTOS BÁSICOS. Resonancia en EPR. Fenómenos de relajación. ESPECTROS EPR. El factor g de Landé o factor desdoblamiento espectroscópico. Estructura hiperfina y constante de acoplamiento hiperfino. Estructura superhiperfina, estructura fina y desdoblamiento a campo cero. TÉCNICAS AVANZADAS EN EPR: RESONANCIAS MÚLTIPLES, ECO DE ESPÍN ELECTRÓNICO Y BIDIMENSIONALES. Electron Nuclear Double Resonance, ENDOR. Electron Spin Echo Envelope Modulation, ESEEM. Espectroscopías bidimensionales en EPR. APLICACIONES DE EPR EN BIOLOGÍA Y MEDICINA. Muestras biológicas con centros paramagnéticos: metaloproteínas y radicales libres. Biomoléculas sin centros paramagnéticos: marcadores de espín.

6. EQUIPO DOCENTE

- [MERCEDES DE LA FUENTE RUBIO](#)

7. METODOLOGÍA

El equipo docente detallará el desarrollo cronológico del curso. De acuerdo con esa programación, se irán facilitando progresivamente los materiales e información básica necesaria para trabajar cada uno de los Temas del programa, así como información sobre las referencias y material complementario con los que, o bien ampliar conocimientos, o bien revisar conceptos que no hayan quedado suficientemente claros.

8. BIBLIOGRAFÍA BÁSICA



Comentarios y anexos:

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.

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

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

Cantor, C.R. y Schimmel, P.R., (1980) "Biophysical Chemistry". W. H. Freeman and Company, New York.

Chang, R. (2000) Physical Chemistry for the Chemical and Biological Sciences, 3ª ed., University Science Books.

Tinoco, I., Jr., Sauer, K, Wang, J.C. y Puglisi, J. D. (2003) Physical Chemistry. Principles and Applications in Biological Sciences. Prentice Hall International, Inc. 4ª Ed.

9. BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

Comentarios y anexos:

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).

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

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

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

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

Weil, J. A. & Bolton, J. R. (2007). Electron Paramagnetic Resonance, 2ª Ed., John Wiley & Sons, Inc.

Siebert, F. & Hildebrandt, P. (2007) Vibrational Spectroscopy in Life Science: Vibrational Spectroscopy in Life Science, Wiley-VCH

Una relación más completa de bibliografía complementaria se facilitará a lo largo del curso, en cada uno de los temas.

10. RECURSOS DE APOYO AL ESTUDIO

El desarrollo del curso se realizará en torno a la plataforma virtual, que nos proporcionará el medio de intercambio de información entre todos los integrantes del curso.

11. TUTORIZACIÓN Y SEGUIMIENTO

Durante el curso, el contacto con el equipo docente se realizará de forma continuada, comunicándonos la evolución y los principales inconvenientes que se encuentren. Este contacto puede ser tan frecuente como se considere oportuno y necesario y se realizará, preferentemente, a través del espacio virtual disponible para el curso.

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

Martes, de 15 a 19 h.



Profesora:

Dra. D^a Mercedes de la Fuente Rubio

Despacho S10 Tel: 91 398 7207

12.EVALUACIÓN DE LOS APRENDIZAJES

La evaluación de la asignatura se realizará de forma continua en base a una serie de trabajos y tareas que le serán encomendadas al alumno a lo largo del curso, con el objetivo de repasar y aplicar los conceptos aprendidos en cada Tema. Al finalizar el curso se realizará una prueba a distancia, a modo de examen, consistente en la resolución de una serie de cuestiones relacionadas con todo el Temario.

13.COLABORADORES DOCENTES

Véase equipo docente.

