

Tópicos de Físicoquímica en Sistemas Biológicos

Descripción General

Esta materia aporta al alumno la formalización de una serie de conceptos propios de la fisicoquímica que resultan de particular interés en biología, pero que no son cubiertos en forma sistemática o suficientemente profunda en otras instancias de la carrera. En ese sentido, provee al alumno herramientas de fundamental importancia para el tratamiento cuantitativo de fenómenos que típicamente son cubiertos en términos cualitativos, facilitando su aproximación a la biofísica y a la biología estructural.

En términos generales, la materia está estructurada de modo de alternar unidades donde se desarrollan formalismos fisicoquímicos y su tratamiento matemático, seguidas de unidades donde estos conceptos son aplicados en profundidad a casos de estudio de relevancia biológica.

En la unidad 1 se cubren conceptos de termodinámica clásica, con especial énfasis en la formalización de los conceptos de potencial químico y electroquímico. Estos conceptos son luego aplicados en la unidad 2 para describir los potenciales asociados a membranas biológicas (transmembrana, de superficie y dipolar) así como las propiedades mecánicas de las membranas y sus procesos asociados.

La unidad 3 introduce los conceptos fundamentales de la termodinámica estadística que luego son utilizados en la unidad 4 para el estudio del equilibrio químico ejemplificado en casos de creciente complejidad tales como la unión de ligandos a proteínas, alosterismo, regulación génica, etc.

La unidad 5 provee conceptos básicos de mecánica cuántica que luego son utilizados en la unidad 6 para el estudio de las teorías actuales de estructura molecular, y en la unidad 7 para el estudio de diversos métodos espectroscópicos de fundamental importancia en biología estructural y en el estudio de mecanismos de reacción.

Las unidades 8 y 9 introducen al alumno a los fenómenos de transporte y a la cinética química, respectivamente. Estos conceptos son luego utilizados para en la unidad 10 para el estudio detallado de las reacciones de transferencia de carga y energía (y teorías asociadas) ejemplificadas en las cadenas de transporte de electrones.

Finalmente, en la unidad 11 se integran todos los conceptos anteriores mostrando la enorme influencia que puede ejercer el fenómeno de *crowding* molecular en sistemas vivos.

Universidad de Buenos Aires

Facultad de Ciencias Exactas y Naturales

Licenciatura en Cs. Biológicas



Int. Güiraldes 2620

Ciudad Universitaria - Pab. II, 4º Piso

CPA: C1428EHA Ciudad Autónoma de Buenos Aires

ARGENTINA.

☎: +54 11 4576-3349

☎ **Fax:** +54 11 4576-3384

Conmutador: 4576-3300 Int.: 206

<http://www.bg.fcen.uba.ar>

Carrera: Licenciatura en Ciencias Biológicas

Código de la carrera: 05

Código de la materia: 5081

NOMBRE ACTUAL DE LA MATERIA

CARÁCTER:

Tache lo que no
corresponde

Curso obligatorio de licenciatura (plan 1984)?

[SI/ NO]

Curso electivo/optativo de licenciatura (plan 1984)?

electivo / ~~optativo~~

**Duración de la
materia:**

16 Semanas

**Cuatrimestre en
que dicta:**

1er.

Cuatrimestr
e

Frecuencia en que se dicta: anual

Horas de clases semanales:	Discriminado por:	Hs.
	Teóricas	4
	Problemas	3
	Laboratorios	Clases mostrativas en laboratorios de investigación dentro del horario regular de cursada
	Seminarios	1
Carga horaria semanal:		8
Carga horaria total cuatrimestral:		128

Asignaturas correlativas:	Introducción a la Biología Celular y Molecular, Química General e Inorgánica I, Análisis I y TP de Física II
Forma de Evaluación:	2 exámenes parciales y 1 seminario. Aprobación de los parciales con 55 puntos / 100 c/u. Promoción de la materia con ambos parciales con no menos de 70 puntos / 100 c/u.

Profesores/as a cargo:	Daniel H. Murgida	
Firma y Aclaración:		Fecha: / /

PROGRAMA ANALÍTICO

1. FUNDAMENTOS TERMODINAMICOS

Repaso de los principios de la Termodinámica. Fundamentos axiomáticos. Sistemas, variables, flujos y campos. Espontaneidad, condiciones de equilibrio. Ecuación de Gibbs. Sistemas multicomponente. Potenciales termodinámicos. Propiedades molares parciales, potencial químico. Sistemas ideales y reales. Equilibrio osmótico y partición. Propiedades termodinámicas asociadas a cambios conformacionales en biomacromoléculas (desnaturalización, plegamiento, etc.). Hidrofobicidad. Sistemas iónicos. Fuerza iónica. Teoría de Debye-Hückel. Potencial electroquímico. Condiciones de estabilidad de sistemas macroscópicos. Conexión con la visión estadística. Sistemas fuera del equilibrio. Producción de entropía. Generalización del principio de Le Chatelier. Hipótesis de equilibrio local. Régimen estacionario lineal.

2. MEMBRANAS BIOLÓGICAS

Estructura de membranas y descripción termodinámica: stretching, bending, shearing y compresión. Estructura, energética y función de vesículas. Dinámica de membranas. Potenciales de superficie, dipolar y transmembrana. Difusión de iones. Movilidad iónica. Equilibrio Donnan. Transporte a través de membranas. Transporte activo y pasivo. El transporte contra gradiente: implicación con fuentes acopladas de energía libre. Bomba de sodio y potasio. Bombas de protones. Hipótesis quimiostática. Transducción nerviosa. Potencial de acción. Polarización-depolarización.

3. TERMODINAMICA ESTADISTICA

Método estadístico. Modos internos. Equipartición de la energía. Peso estadístico. Distribución de Probabilidad. Función de distribución de Boltzmann. Ensamblajes. Partículas independientes. Función de partición para modos internos. Función de partición clásica. Relación entre propiedades microscópicas y macroscópicas: espacio de las fases y propiedades termodinámicas. Función de Correlación. Métodos de simulación de Monte Carlo y Dinámica Molecular. Aplicaciones a propiedades de soluciones acuosas, hidratación de iones, interacción del agua con proteínas y DNA.

4. EQUILIBRIO QUIMICO

Interacciones entre macromoléculas. Interacciones macromolécula-ligando. Equilibrio químico y afinidad química. Unión específica e inespecífica. Cooperatividad. Alosteroismo. Diagramas de Hill y Scatchard. Modelos MWC y KNF. Tratamiento estadístico del equilibrio químico en sistemas biológicos.

5. FUNDAMENTOS DE MECANICA CUÁNTICA

Postulados de la mecánica cuántica. Ecuación de Schrödinger. Modelos sencillos con solución analítica: partícula libre, partícula en una caja, barrera de potencial, efecto túnel, oscilador armónico, rotor rígido. Degeneración. Conceptos de teoría de perturbaciones. Método variacional lineal.

6. ESTRUCTURA MOLECULAR

Descripción clásica de la estructura de macromoléculas: péptidos, proteínas y ácidos nucleicos. Estabilidad estructural. Interacciones moleculares (tipo y origen de las mismas). Tipos de fuerzas intermoleculares y modelos. Unión H. Mecánica molecular. Potenciales moleculares. Optimización de geometría mediante métodos clásicos. Superficies de energía libre. Dinámica de solvatación. Transiciones estructurales en biomacromoléculas. Métodos aproximados para la resolución de la ecuación de Schrödinger.

7. ESPECTROSCOPIAS ELECTRÓNICAS Y VIBRACIONALES

Interacción radiación-materia. Fenómenos de absorción, emisión y dispersión. Orbitales moleculares y transiciones electrónicas. Principio de Franck-Condon. Regla de oro de Fermi. Reglas de selección. Diagramas de Jablonski. Fotofísica y fotoquímica. Vibraciones moleculares. Actividad óptica. Instrumentación y aplicaciones biológicas de absorción UV-vis, dicroísmo circular, FTIR, Raman, fluorescencia. Técnicas estacionarias y resueltas en el tiempo. Microscopías acopladas a espectroscopía.

8. MOVIMIENTO MOLECULAR Y PROPIEDADES DE TRANSPORTE

Visión estadística de la dinámica biológica. Movimiento Browniano. Distancia cuadrática media. Coeficiente de difusión. Ecuaciones de Stokes y de Einstein. Fricción viscosa. Difusión: primera y segunda ley de Fick. Longitud de polímeros. Transiciones hélice-ovillo. Difusión a nivel subcelular.

9. CINÉTICA QUÍMICA

Reacciones y catálisis enzimática. Movimiento molecular a lo largo de una coordenada de reacción. Coherencia dinámica. Efecto isotópico. Tunneling y efectos cuánticos

10. TRANSFERENCIA ELECTRÓNICA Y DE ENERGÍA

Teoría de las reacciones de transferencia electrónica. Cálculos por métodos clásicos y cuánticos de la transferencia electrónica. Factores nuclear, electrónico y de frecuencia en reacciones de transferencia electrónica. Teoría de Marcus y modelos cuánticos. Dependencia de la distancia en las reacciones de transferencia electrónica. Transferencias electrónicas a largas distancias en proteínas y entre proteínas. Modelos de Dutton y Gray. Fotoseparación de cargas. Transferencia electrónica fotoinducida en vesículas, membranas, bicapas y en proteínas. Transferencia protónica. Técnicas experimentales. Radiólisis, fotólisis flash, recuento de fotones (photon counting), TR-Raman, step-scan FTIR. Métodos fotoacústicos y fototérmicos. Casos de estudio: fosforilación oxidativa y fotosíntesis.

11. CROWDING

Efecto del crowding sobre el equilibrio químico y la dinámica de procesos en sistemas biológicos. Tratamiento estadístico en base a modelos de grillas.

BIBLIOGRAFIA GENERAL

-Physical Chemistry. Principles and Applications in Biological Sciences. Tinoco, Sauer, Wang, Puglisi. 2002 - Prentice Hall (ISBN 0-13-017960-4)

-Principles of Physical Biochemistry. Van Holde, Curtis Johnson, Shing Ho. 2006 - Pearson Education (ISBN 0-13-201744-x).

-Biophysical Chemistry. Allen. 2008 – Blackwell Publishing (ISBN 978-1-4051-2436-2).

-Fisicoquímica. Atkins, De Paula. 2002 – W.H. Freeman and Company (ISBN 0-7167-3539-3).

-Physical Biology of the Cell. Phillips, Kondev, Theriot. 2009 – Garland science (ISBN 978-0-8153-4163-5).

BIBLIOGRAFIA ESPECÍFICA

-Molecular Driving Forces. Statistical Thermodynamics in Chemistry and Biology. Dill, Bromberg. 2003 – Garland Science (ISBN 978-0-8153-2051-7)

-Methods in Modern Biophysics. Nölting. 2006 – Springer (ISBN 13-978-3-540-27703-3)

-Physical Methods in Bioinorganic Chemistry: Spectroscopy and Magnetism. Que. 2000 – University Science Books (ISBN 1-891389-02-5)

-Electron Transfer in Inorganic, Organic and Biological Systems. Bolton, Mataga, McLendon. 1989 – ACS (ISBN 0-8412-1846-3)

-Electron Transfer in Chemistry and Biology: An Introduction to the Theory. Kuznetsov, Ulstrup. 1999 – Wiley (ISBN 0-471-96749-1)

-Introduction to Molecular Dynamics and Chemical Kinetics. Billing, Mikkelsen. 1996 – Wiley (ISBN 0-471-12739-6)

-Mecánica Cuántica para Químicos. Hanna. 1985 – Fondo Educativo Interamericano (ISBN 968-858-010-4)

- Molecular Modeling, A.R. Leach, Longman, 1996.

-The Physical Chemistry of Membranes. Starzak. 1984 – Academic Press (ISBN 0-12-664580-9)