

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 BIOLOGICAS

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. Ensambls. 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. Alosterismo. 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)