

Actividad Curricular (curso): **Introducción a la Biología de Macromoléculas**

Horas Totales: **40 hs**

Horas Teóricas: **20 hs**

Horas prácticas: **20 hs**

Docente: **Silvina Fornasari / Cristina Marino Buslje / Gustavo Parisi**

### **Fundamentación:**

Los objetivos de la asignatura se centran en lograr una comprensión molecular y estructural de distintas macromoléculas para poder contar con una base biológica y bioquímica que permita en las siguientes asignaturas de la carrera encarar con enfoque bioinformático problemas biológicos.

### **Objetivos Generales:**

Alcanzar conocimientos elementales vinculados con cuestiones fisicoquímicas, topológicas y estructurales de las principales macromoléculas de importancia biológica.

### **Objetivos Específicos:**

Brindar las bases moleculares, fisicoquímicas, estructurales y funcionales de distintas macromoléculas (DNA, RNA y proteínas). Alcanzar conocimientos elementales vinculados con cuestiones topológicas y estructurales de las principales macromoléculas de importancia biológica.

### **Unidades Temáticas**

**Unidad 1:** Agua: propiedades físico - químicas, propiedades ácido – base. Ácidos y bases débiles. pH. Soluciones reguladoras de pH. Ecuación de Henderson – Hasselbach. Interacciones débiles (no covalentes) entre moléculas que involucran cargas o densidades de carga: interacción iónica, interacciones de Van der Waals, puente de Hidrógeno. Efecto hidrofóbico. Fundamento termodinámico de las interacciones no covalentes. Variación de la energía de la interacción con la temperatura. Caracterización energética de una macromolécula. Potenciales de energía

**Unidad 2:** Introducción al estudio de las macromoléculas de interés biológico. Definición. Las macromoléculas como polímeros biológicos. Características biológicas y bioquímicas generales. Composición química. Métodos de estudio y caracterización.

**Unidad 3:** Ácidos nucleicos: clasificación y funciones biológicas. Composición química. Caracterización de niveles estructurales en ADN y ARN. Fuerzas e interacciones que determinan estas estructuras. Relación entre estructura y función. Desnaturalización térmica. Agentes desnaturalizantes. Superenrollamiento. Bases secuenciales de cambios topológicos y estructurales. Efecto de mutaciones. Predicción estructural a nivel secundario y terciario.

**Unidad 4:** Proteínas: clasificación y funciones biológicas. Proteínas simples y complejas. Propiedades físicas y químicas de los polipéptidos. Conformaciones de péptidos y

proteínas. Parámetros estructurales. Niveles de estructura: primaria, secundaria, terciaria y cuaternaria. Interacciones que determinan la conformación de las proteínas en sus distintos niveles estructurales. Información secuencial y su relación con la estructura proteica. Plegamiento y dominios estructurales.

**Unidad 5:** Relación estructura-función en proteínas. Hipótesis que explican dicha relación. Dinámica y diversidad conformacional. Estudio de cavidades, superficies y túneles. Base estructural de alosterismo y cooperativismo. Catálisis enzimática y dinámica molecular.

**Unidad 6:** Interacciones proteína-proteína. Oligómeros transitorios y permanentes. Funciones biológicas y ejemplos. Asociación de proteínas con otras moléculas de interés biológico: complejos supramacromoleculares. Motores moleculares. Métodos de estudio.

### **Bibliografía obligatoria**

- Branden and Tooze. Introduction to protein structure. Garland Publishing, Inc. 1991
- Creighton. Proteins. Structures and Molecular Properties. Second Edition. Freeman and Company. 1993
- Lodish, H. Darnell, J. Biología celular y molecular. 5 Ed.2005.
- Nelson, D.L.; Cox, M.M. Lehninger. Principios de bioquímica (5ª ED.). Ediciones Omega S.A (Barcelona, España). 2009.
- Puglisi, J. Structure, Dynamics and Function of Biological Macromolecules and Assemblies. IOS Press. 2005.
- Roberts, GCK. NMR of Macromolecules. A practical Approach. IRL Press . 1993
- Tsai, S. Biomacromolecules: Introduction to Structure, Function and Informatics. Willey 2006.
- Voet and Voet. Biochemistry. Fourth Edition. Wiley and Sons. INC.2011
- Whitford, D. Proteins: Structure and Function. Wiley. 2005.

### **Describir las actividades prácticas a desarrollar, indicando lugar donde se desarrollarán, modalidad de supervisión y de evaluación:**

Se llevarán a cabo 6 prácticas computacionales cuyo principal objetivo es analizar y estudiar propiedades estructurales de distintas macromoléculas

1. **Uso de programas de visualización de macromoléculas:** el objetivo de este TP es que los alumnos se familiaricen con el uso de programas de visualización. La práctica se centra en las distintas formas de visualización, como selección de determinados grupos químicos y medición de distancias.
2. **Interacciones no covalentes:** en este TP se exploran las distintas interacciones no covalentes que estabilizan a distintas macromoléculas (carga-carga, carga –dipolo, puente de hidrógeno, pi-pi y pi-catión)

3. **Plegamientos y dominios proteicos:** en el TP se estudian computacionalmente distintos plegamientos, proteínas oligoméricas y los respectivos dominios estructurales.
4. **Estructura secundaria y terciaria en ácidos nucleicos:** Con la ayuda de los programas de visualización se exploran los distintos tipos de estructura terciaria y secundaria en AN.
5. **Determinación de parámetros termodinámicos en ácidos nucleicos:** Utilización de programas de cálculo para la estimación de parámetros termodinámicos de distintos AN (por ej. temperatura de fusión).
6. **Estudio de propiedades estructurales en proteínas:** Utilizando distintos programas se estudiarán distintas propiedades fisicoquímicas de superficies moleculares de distintas proteínas, existencia de conductos y canales en las proteínas por donde transitan los respectivos ligandos (sustratos/productos)

**Criterios y Formas de Evaluación del curso. Requisitos de aprobación del curso:**

Examen teórico y práctico.