

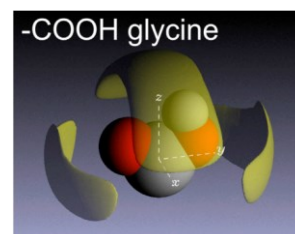


GUÍA CONCEPTUAL

1. ¿Qué funciones piensa que cumple el agua de hidratación de una biomacromolécula? ¿Qué espera que suceda si dicha molécula sufre una deshidratación?
2. Explique la diferencia entre absorción y adsorción. De ejemplos aclaratorios. En un experimento de isoterma de sorción ¿cómo puede distinguir a que caso corresponde?
3. Explique cómo es el proceso de desnaturalización de una proteína provocado por la presencia de un co-soluto como la urea.
4. Ingrese a la pagina <http://biomodel.uah.es/model1j/prot/inicio.htm> Recorra el “Tercer nivel: asociación, Estructura cuaternaria”, especialmente el caso de la Hemoglobina (puede hacerlo en la Sala de Computación de los estudiantes de nuestra facultad). Use el icono  para realizar una acción,  para pasar a la página siguiente. En la zona gráfica, el botón derecho del ratón permite controlar las características de la representación molecular.

GUÍA DE ACTIVIDADES

1) ¿Considera posible la utilización de las funciones de distribución radial para estudiar la hidratación de proteínas obtenida por simulación computacional? ¿Si las utiliza, que tipo de información espera obtener? (tenga en cuenta que la proteína no es una estructura homogénea como en un líquido de manera que la elección de la referencia de $g(r)$ no es arbitraria). A modo de ejemplo discuta con los docentes la siguiente imagen del grupo carboxilo del aminoácido glicina.



- 2) ¿Qué entiende por agua de hidratación específica y general? ¿Cómo distinguiría experimentalmente una de otra?
- 3) a) ¿Cómo haría un paralelo entre el agua de hidratación de un proteína y el movimiento de personas en una galería comercial? ¿Cuáles serían los sitios de hidratación específica y cuáles los de hidratación inespecífica? ¿Cuáles los de agua bulk? ¿Son siempre las mismas personas en los sitios?
b) ¿Cómo espera que sea el tiempo de residencia relativo para las diferentes aguas de hidratación de una proteína con respecto al agua bulk?

4) Los datos que se dan a continuación corresponden a experimentos donde se mide la cantidad de agua captada por diferentes materiales en función de la presión de vapor a temperatura constante.

a) Agua adsorbida en poliestireno-sulfonato a 25 °C

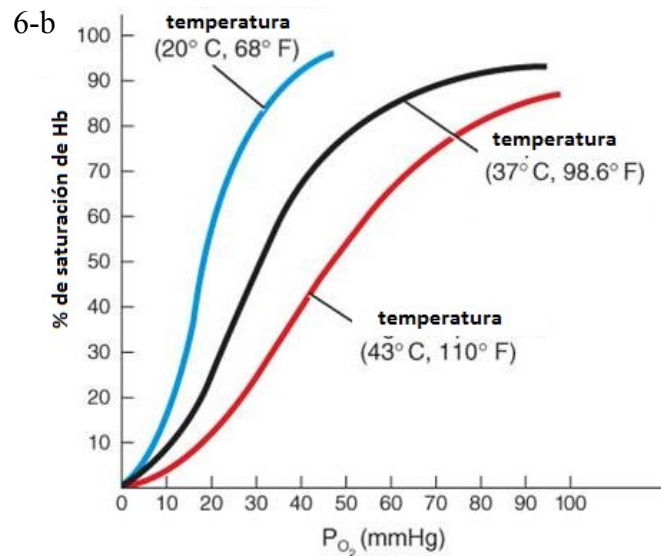
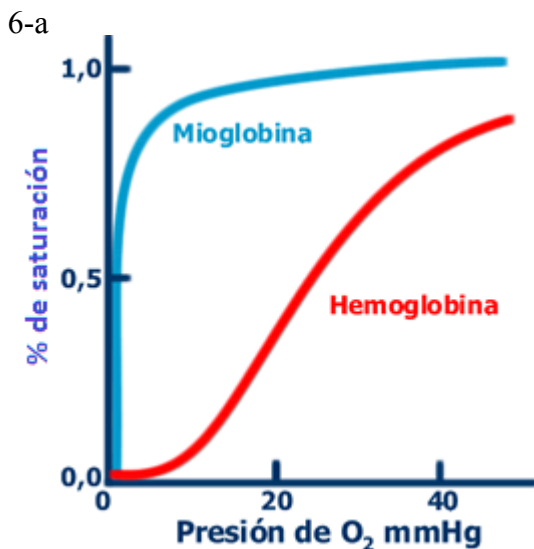
b) Hipotético

p/p_0	N/(moles agua /eq. adsorbente)
0,0	0,000
0,1	0,088
0,2	0,119
0,3	0,131
0,4	0,151
0,5	0,191
0,6	0,315
0,7	0,495
0,8	0,726
0,9	1,306

p/ p_0	N (arbitrario)
0,0	0,000
0,1	0,645
0,2	0,900
0,3	1,070
0,4	1,150
0,5	1,182
0,6	1,190
0,7	1,192
0,8	1,195
0,9	1,197

a) Grafique los datos anteriores.

- b) Describa una (o varias) posible(s) manera(s) de efectuar este tipo de experimentos para obtener los datos mostrados.
- c) Describa las diferencias entre una curva y otra e indique que información puede extraer del comportamiento del proceso en cada caso.
- d) Proponga una explicación racional del proceso en términos fisicoquímicos (es decir, analizando el proceso de incorporación de agua en cada caso).
- e) Se sabe que el agua de hidratación de una cierta molécula tiene menos movilidad que la del seno de la solución. ¿Qué técnicas experimentales utilizaría para confirmar este hecho? Explique
- 5) a) Una proteína globular posee la mayor parte de sus grupos no-polares hacia su interior. ¿Qué razones termodinámicas daría para explicar ese comportamiento? ¿Y para explicar que algún grupo no-polar pueda quedar en la superficie?
- b) Consideremos una proteína de trans-membrana.
- ¿Toda su superficie tendrá las mismas características?
 - ¿Cómo intentaría solubilizarla?
 - Después del proceso de solubilización, ¿Espera que tenga la misma actividad que en estado nativo? ¿Por qué?
- 6) En la figura 6-a se presenta la saturación de la Mioglobina (Mb) y la Hemoglobina (Hb) vs la presión parcial de Oxígeno. a) De alguna razón para explicar la diferencia entre ambas proteínas. b) En la figura 6-b se observa el comportamiento de saturación de Hb vs presión parcial de Oxígeno a diferentes temperaturas ¿Qué observa? Estudiando los diferentes efectos dependiente con la temperatura ¿Qué explicación puede dar al respecto? c) Explique cómo es el proceso de desnaturalización de la hemoglobina que lleva a la enfermedad endémica conocida como Anemia Falciforme.



- 7) a) ¿Qué entiende por estado natural (nativo) y por estado desnaturalizado de una biomacromolécula en solución? b) ¿Cómo puede medir su grado de estabilidad? Dé ejemplos de cómo se puede provocar experimentalmente y en forma controlada la desnaturalización de biomacromoléculas en solución. Nombre técnicas que permitan estudiarlo.
- 8) Si calentamos una proteína globular en algún punto se producirá la desnaturalización. ¿Podría describir los distintos efectos que produce la temperatura en cada una de las fuerzas que estabilizan la estructura? ¿Cómo juega el balance de fuerzas a las diferentes T?
- 9) ¿La Temperatura de melting (T_m) del ADN es una medida de que efecto? ¿Por qué? Considerando lo anterior ¿Cómo interpreta los siguientes resultados experimentales, observados al estudiar la desnaturalización térmica del ADN en solución por medio de absorción de radiación UV en 260 nm?
- Al aumentar la concentración iónica del medio aumenta T_m y viceversa.
 - Al aumentar la permitividad eléctrica del medio aumenta T_m y viceversa.
 - La urea disminuye la T_m y la glucosa la aumenta.