

21 91

RESONANCIA PARAMAGNETICA ELECTRONICA
EN ESTUDIOS ESTRUCTURALES.

Curso de post-grado.

A cargo de : Dra Hilda Pezzano
Dra Alicia Batana

PROGRAMA.

1) Potencialidad de la resonancia de spin electrónico en investigaciones biológicas. Principios básicos del fenómeno de resonancia magnética. Poblaciones de los niveles de spin. Factores que influyen en estas poblaciones.

2) Características de los espectros. Parámetros espectrales : intensidad y ancho de las líneas; formas de línea; el factor espectroscópico g. Estructura fina e hiperfina del espectro: su origen. Casos de átomos y moléculas con un solo electrón no apareado, y con más de un electrón no apareado.

3) Fundamentos de la técnica experimental de EPR. Determinación práctica de la sensibilidad de un espectrómetro. Determinación del factor espectroscópico g; su importancia para la identificación de un espectro. Determinación de la concentración de átomos ó moléculas conteniendo electrones no apareados.

4) Características generales de los espectros de radicales libres. Determinación de la densidad del electrón no apareado sobre los átomos del radical: vinculación con la especificidad del radical al participar en reacciones químicas. Detección de radicales en estudios cinéticos.

5) Espectros de moléculas en estado triplete. Excitación de proteínas al estado triplete. Aplicación de EPR al estudio de la actividad carcinogénica de moléculas. Similitud del comportamiento de algunas moléculas orgánicas con el caso de los semiconductores.

6) Espectros EPR de iones metálicos. Orbitales atómicos y niveles de energía de iones metálicos de los grupos de transición. Estructura hiperfina de los espectros. Diversos complejos formados por metales de transición; estructura superhiperfina de los espectros. Parámetros espectrales medibles.

7) Características espectrales de complejos de cobre. Influencia de la geometría molecular alrededor del átomo metálico. Casos de asociación del ión cúprico con aminoácidos, bases purínicas y pirimidínicas, y con mononucleótidos. Interacción del ión cúprico con proteínas y ácidos nucleicos. Características espectrales de moléculas bioquímicas que contienen cobalto.


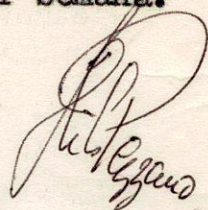
8) Estudio de moléculas relacionadas con el núcleo de la porfirina que contienen distintos átomos metálicos. Caso de la hemoglobina: estados de alto y bajo spin del átomo de hierro en el plano del hemo. Anisotropía del estado de alto spin. Determinación de la orientación del plano del hemo a partir de parámetros espectrales. Información estructural obtenida de: ancho de línea, separación hiperfina y parámetros a campo cero.

9) Estudios de enzimas que contienen metales de transición. Formación de complejos ternarios con participación de metales de transición. Casos de enzimas que contienen el grupo del hemo. Marcadores de spin: su empleo para determinar cambios de conformación en enzimas y otras macromoléculas.

10) Uso de técnicas de computación en casos de dificultosa determinación directa de los parámetros espectrales. Aplicación al caso de enzimas.

Prácticas experimentales sobre: complejos de metales de transición usando el equipo EPR de banda X del Dpto de Química Inorgánica, Analítica y Química-Física. Se incluirá aplicación de métodos de computación.

Nota: El curso se extenderá por alrededor de 15 semanas, con 5 horas de clases teórico-prácticas por semana.



Dra. J. F. POSSIDONI de ALBINATI
DIRECTORA DEL DPTO. DE
QUIMICA INORGANICA ANALITICA
Y QUIMICA - FISICA