

Benemérita Universidad Autónoma de Puebla
Doctorado en Ciencias Químicas

BIOINORGÁNICA

Programa semestral: 96 h.

Objetivos del curso:

Proveer a los estudiantes el conocimiento de los avances más recientes en el estudio de los elementos esenciales para la vida, la biomimética de sitios activos de metaloenzimas y metaloproteínas, y el uso de otros elementos en diagnóstico y terapia de algunas enfermedades, así como de otras aplicaciones ambientales e industriales.

TEMARIO:

Tema 1: Introducción a la Química Bioinorgánica: objeto. Iones metálicos en los organismos vivos. Elementos esenciales y elementos traza. Distribución en la corteza terrestre. Biodisponibilidad. Metodología de la Química Bioinorgánica. Compuestos modelo.

Tema 2: Propiedades de los iones de transición. Formación de compuestos de coordinación. El enlace en los compuestos de coordinación: teoría del campo del cristal y teoría de los orbitales moleculares.

Tema 3: Estabilidad y reactividad de los compuestos de coordinación. Cinética y mecanismos de reacción. Propiedades magnéticas y espectros electrónicos.

Tema 4: Métodos experimentales en Química Bioinorgánica. Métodos de difracción. EXAFS. Medidas de la susceptibilidad magnética. Resonancia paramagnética electrónica. Métodos espectroscópicos: resonancia magnética nuclear, espectroscopía visible-ultravioleta y espectroscopía infrarroja. Otros métodos.

Tema 5: Química bioinorgánica de los metales alcalinos y alcalinotérreos. Complejos con ligantes macrocíclicos. Eteres corona. Transporte activo de cationes a través de las membranas. Mecanismos.

Tema 6: Química bioinorgánica del hierro(1). Captación, transporte y almacenamiento de hierro. Transportadores de oxígeno: hemoglobina. Coordinación del hierro. Transportadores de oxígeno sintéticos.

Tema 7: Química bioinorgánica del hierro(2). Proteínas transportadoras de electrones. Citocromos. Proteínas hierro-azufre: rubredoxinas y ferredoxinas. Clusters y compuestos modelo.

Tema 8: Química bioinorgánica del cobre. Coordinación del cobre en sus proteínas: clasificación y tipos de centros activos. Compuestos modelo para las proteínas de cobre. Transporte de electrones.

Tema 9: Funciones biológicas de molibdeno y wolframio. Molibdoenzimas. Cofactor molibdeno-pterina. Nitrogenasa. Compuestos modelo.

Tema 10: Química Bioinorgánica del Zinc. Proteínas más importantes de este elemento. Compuestos modelo.

Tema 11: Química bioinorgánica de otros iones metálicos. Bioinorgánica del Mn, Co y Ni. Centros activos de las metaloproteínas. Compuestos modelo.

Tema 12: Contaminación por iones metálicos pesados: Cd, Pb, Hg y As. Metalotioneínas. Mecanismos de quelación. Agentes quelatantes utilizados en la separación de iones metálicos de los organismos vivos.

Tema 13: Metales en medicina. Metales utilizados en diagnóstico y en quimioterapia. Radioisótopos. Compuestos anticancerígenos: el *cis*-platino y sus derivados.. Enlace al DNA y relación estructura-actividad.

Tema 14: Materiales inorgánicos biogénicos. Bioinorgánicos: tipos y funciones. Mecanismos de control. Centros de control. Morfología y superficie de cristales.

Perfil del alumno al terminar el curso:

El alumno será capaz de conocer la química de los elementos esenciales para la vida y su relevancia biológica. Podrá extraer los metalobiositios de metaloproteínas y metaloenzimas a partir de las estructuras tridimensionales de éstas, depositadas en el Protein Data Bank (PDB). A su vez podrá describir los principales mecanismos de reacción de las metaloproteínas en los cuales existe evidencia experimental para respaldarlos. Estará enterado de los avances más recientes de la biomimética, así como de la utilización de compuestos bioinorgánicos en el diagnóstico y terapia de diversas enfermedades. También conocerá de los más recientes hallazgos en materiales nanoestructurados y su relación con la bioinorgánica.

Marco Conceptual:

Materia Optativa de área:

Para poder adentrarse en este curso es necesario haber cursado: Química Inorgánica avanzada I, Química Inorgánica Avanzada II y Métodos Espectroscópicos, así como tener conocimientos básicos de Bioquímica. El curso se enfoca en el estudio de los principales elementos esenciales para la vida y de los ligantes biológicos a los que se unen., así como., las tres funciones consideradas esenciales: Transporte de moléculas, transporte de electrones y activación de moléculas. También se abordará el estudio de

elementos no esenciales usados en diagnóstico y tratamiento de enfermedades, aplicaciones de metaloproteínas y compuestos modelo de estas, así como recientes avances en biomimética de sitios activos de metaloenzimas. El curso es fundamental para a todos aquellos testistas cuyos trabajos de investigación estén relacionados al área de bioinorgánica.

Proceso enseñanza aprendizaje:

El curso consistirá en exposiciones del tema en power point, seguido de discusiones y ejercicios. El uso de visualizadores moleculares (Rasmol, Chime, Protein explorer, VD, quimera y Yasara) será ampliamente utilizado. Actividades experimentales serán también realizadas para ejemplificar conceptos fundamentales.

Actividades de evaluación

La evaluación será cotidiana, sin embargo al finalizar el curso el estudiante presentará a manera de e-book todos los materiales consultados durante el curso, así como un video describiendo los acontecimientos más relevantes de la bioinorgánica..

Acreditación:

La descripción de una metaloproteína o metaloenzima recientemente depositada en PDB, presentada en power point, el haber cumplido con 80% de las asistencias, la presentación del video y la entrega del e-book serán necesarios para que el curso quede acreditado

BIBLIOGRAFÍA

- OCHIAI, E -1985- “Química Bioinorgánica. Una Introducción”., Ed. Reverté, Barcelona (edición en inglés de 1978).
- FRAUSTO da SILVA, J.J.R. y WILLIAMS, R.J.P. –2001- “The Biological Chemistry of the Elements: The Inorganic Chemistry of Life”, Segunda Edición. Oxford University Press, Oxford.
- BARAN, E.J. –1994- “Química Bioinorgánica”, McGraw-Hill e Interamericana de España S.A., Madrid.
- BERTINI, I, GRAY,H.G., LIPPARD, S.J. y VALENTINE, J.S. –1994- “Bioinorganic Chemistry”, University Science Books, Mill Wallely, California.
- LIPPARD, S.J. y BERG, J.M. –1994- “Principles of Bioinorganic Chemistry”, University Science Books, Mill Waley, California.
- KAIM, W y SCHWEDERSKI, B. –1994- “Bioinorganic Chemistry: Inorganic Elements in the Chemistry of Life. An Introduction and Guide”, John Wiley and Sons, New York.
- “Handbook of Metal-Ligand Interactions in Biological Fluids”. Bioinorganic Chemistry, vol.1 y 2. Bioinorganic Medicine, vol. 1 y 2. Editado por G. Berthon, Marcel Dekker, Inc., New York, 1995.

- FENTON, D.E. –1995- “Biocoordination Chemistry”. Oxford University Press, Oxford.
- COWAN, J.A. –1997- “Inorganic Biochemistry: An introduction”. 2ª Ed., Wiley-VCH Inc., New York.
- CASAS J.S., MORENO V., SÁNCHEZ A., SÁNCHEZ J.L. y SORDO J.-2002- “Química Bioinorgánica”, Ed. Síntesis, Madrid.
- VALLET M., FAUS J., GARCIA-ESPAÑA E., MORATAL J.-2003- “Introducción a la Química Bioinorgánica”, Ed. Síntesis, Madrid.
- ROAT-MALONE R.M.- 2007. 2nd Edition. Bioinorganic Chemistry: A Short Course. Jhon Wiley & Sons.
- BERTINI, I. GRAY, H., STEIFEL, E. I., SELVERSTONE VALENTINE, J. “Biological Inorganic Chemistry: Structure and Reactivity”. -2007- University Science Books. USA.