

# CURSO DE POSGRADO DE PEDECIBA QUÍMICA -2020

**Área:** Química Orgánica

**Nombre del curso:** Curso Avanzado de Elucidación Estructural de Carbohidratos

**Docentes responsables:**

- Carolina Fontana (Departamento de Química del Litoral, CENUR Litoral Norte - SRA Facultad de Química)
- Fernando Ferreira (Departamento de Química Orgánica, Facultad de Química)

**Docentes participantes:**

- Carolina Fontana (Departamento de Química del Litoral, CENUR Litoral Norte - SRA Facultad de Química)
- Fernando Ferreira (Departamento de Química Orgánica, Facultad de Química)
- Cristina Olivaro (Espacio de Ciencia y Tecnología Química, Centro Universitario de Tacuarembó)

**Lugar de dictado:**

- Los teóricos, prácticos y seminarios se dictarán presencialmente en Paysandú, Tacuarembó y/o Montevideo.\*
- El laboratorio 1 se realizará en el Centro Universitario de Tacuarembó.\*
- El laboratorio 2 se realizará en la Estación Experimental Mario A. Cassinoni, Paysandú.\*

**NOTA:** Considerando la situación sanitaria actual del país, en el año 2020 se planea dictar el curso en forma virtual. Los laboratorios se coordinarán según el lugar de residencia de los estudiantes inscriptos (etapas de preparación de muestras), y el acceso al equipamiento especializado (espectrómetros de masa y RMN) podrá (alternativamente) realizarse en forma remota.

**Frecuencia:** anual

**Semestre:** par

**Carga horaria total:** 44 hrs totales (6 hrs semanales distribuidas en 2 hrs de teórico + 4 horas de práctico o laboratorio)

- Teóricos: 14 hrs totales
- Laboratorio seco (prácticos): 16 hrs totales
- Laboratorio húmedo: 8 hrs totales
- Seminarios: 6 hrs totales presenciales

**Audiencia:** Está dirigido a investigadores y estudiantes de posgrado de Química y Bioquímica. También podrán cursar estudiantes de grado que tengan aprobado el curso de Química Orgánica 104 de la Facultad de Química (o tengan formación equivalente)

**Créditos:** 6

**Cupo:** Mínimo 5 – Máximo 20

**Régimen de Ganancia:** Se deberán cumplir las siguientes condiciones:

- Asistencia al 80% de las clases.
- Preparación y presentación de un seminario.
- Aprobación de una prueba escrita al final del curso.

## CURSO DE POSGRADO DE PEDECIBA QUÍMICA -2020

**Objetivos:** Este curso pretende introducir al estudiante a distintas técnicas que se emplean actualmente en la caracterización de oligo- y polisacáridos, tanto desde el punto de vista de su estructura, conformación y dinámica, así como también su tamaño y forma. Se mencionarán además técnicas para el estudio de interacciones proteína-carbohidrato y aspectos básicos de bioinformática para el estudio de información genética relacionada con la biosíntesis de estas biomoléculas.

En el curso se utilizarán principalmente polisacáridos bacterianos como ejemplos, pero las herramientas en las que se profundizarán serán de utilidad para el estudio de cualquier tipo de glicoconjugado. Se destinarán horas prácticas para el entrenamiento en el uso de herramientas informáticas (softwares y bases de datos), relevantes para el análisis de información genética, datos de espectroscopía de RMN, espectrometría de masas y modelado molecular, entre otros. Se realizarán dos prácticas de laboratorio húmedo, en los que los estudiantes aplicarán los conocimientos impartidos durante el curso. Finalmente se destinará un día para la presentación de seminarios por parte de los estudiantes, enfocados en temas relacionados con la temática del curso.

### Programa Detallado

#### Teóricos

- 1. Conceptos generales sobre la estructura de carbohidratos (2 hrs).** Importancia biológica. Estructura química, conceptos básicos de nomenclatura (recomendaciones IUPAC, notación estándar y SNFG, etc.). Variedad estructural de carbohidratos.
- 2. Polisacáridos bacterianos y vacunas polisacarídicas (2 hrs).** Generalidades sobre la estructura de lipopolisacáridos (LPS) y aspectos biosintéticos. Polisacáridos capsulares (CPS) y ejemplos de vacunas polisacarídicas. Exopolisacáridos (EPS).
- 3. Espectrometría de masas de carbohidratos (2 hrs).** Repaso sobre conceptos generales de espectrometría de masas. Tratamientos para el estudio de carbohidratos. Fragmentaciones típicas de carbohidratos.
- 4. Espectroscopía de RMN de carbohidratos 1 (2 hrs).** Repaso de conceptos básicos de RMN, desplazamientos químicos de  $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$ ,  $^{15}\text{N}$  y  $^{31}\text{P}$ , y constantes de acoplamiento. Experimentos 2D básicos para estudios estructurales:  $^1\text{H}, ^1\text{H}$ -TOCSY,  $^1\text{H}, ^{13}\text{C}$ -HSQC,  $^1\text{H}, ^{13}\text{C}$ -HMBC y  $^1\text{H}, ^1\text{H}$ -NOESY.
- 5. Espectroscopía de RMN de carbohidratos 2 (2 hrs).** Experimentos avanzados: supresión de agua, análisis de protones intercambiables,  $^1\text{H}, ^{13}\text{C}$ -HMBC de banda selectiva, experimentos de  $^{31}\text{P}$  ( $^1\text{H}, ^{31}\text{P}$ -HMBC y  $^1\text{H}, ^{31}\text{P}$ -hetero-TOCSY) y  $^{15}\text{N}$  ( $^1\text{H}, ^{15}\text{N}$ -HSQC y  $^1\text{H}, ^{15}\text{N}$ -HMBC). Análisis de la estructura primaria y secuencia de carbohidratos. Estimación del tamaño de PS (identificación del extremo terminal, y medidas de coeficientes de difusión).
- 6. Análisis de la estructura tridimensional de carbohidratos y sus interacciones con otras biomoléculas (2 h).** Aspectos conformacionales de monosacáridos, oligosacáridos y polisacáridos. Técnicas de espectroscopía de RMN para el estudio de la conformación y dinámica de carbohidratos. Estudio de interacciones proteína-carbohidrato por espectroscopía de RMN y Modelado Molecular.
- 7. Métodos de obtención, purificación y análisis fisicoquímico de carbohidratos (2 hrs).** Aislamiento de oligo- y polisacáridos de fuentes naturales. Métodos de purificación (cromatografía de exclusión por tamaño, intercambio iónico, etc.). Análisis de componentes y determinación de la configuración absoluta. Dispersión de luz láser multiángulo (MALS), dispersión de luz dinámica (DLS).

## CURSO DE POSGRADO DE PEDECIBA QUÍMICA -2020

### Prácticos:

- **Práctico 1 (4 hrs):** Empleo de herramientas informáticas (softwares y bases de datos) para el estudio la estructura y conformación de carbohidratos.
- **Práctico 2 (4 hrs):** Análisis bioinformático del clúster de genes de un antígeno O-específico.
- **Práctico 3 (4 hrs):** Análisis estructural de un oligo/polisacárido utilizando espectroscopía de RMN.
- **Práctico 4 (4 hrs):** Análisis conformacional de un oligo/polisacárido utilizando espectroscopía de RMN y modelado molecular.

### Laboratorios:

- **Laboratorio 1 (4 hrs):** Análisis de un oligosacárido utilizando espectrometría de masas.
- **Laboratorio 2 (4 hrs):** Determinación del peso molecular promedio de un polisacárido utilizando experimentos de RMN de difusión, y por integración de señales del extremo terminal.

### Cronograma 2020

Semana	Fecha	Actividad
1	26/10	<b>Teórico 1:</b> Estructura de Carbohidratos <b>Práctico 1:</b> Herramientas Informáticas
2	2/11	<b>Teórico 2:</b> Polisacáridos Bacterianos y Vacunas <b>Práctico 2:</b> Bioinformática
3	9/11	<b>Teórico 3:</b> Espectrometría de Masas de Carbohidratos <b>Laboratorio 1:</b> Espectrometría de Masas de Carbohidratos
4	16/11	<b>Teórico 4:</b> Espectroscopía de RMN 1 <b>Práctico 3:</b> Análisis estructural de un oligo- o polisacárido utilizando espectroscopía de RMN
5	23/11	<b>Teórico 5:</b> Espectroscopía de RMN 2 <b>Laboratorio 2:</b> Espectroscopía de RMN de difusión
6	30/11	<b>Teórico 6:</b> Espectroscopía de RMN 3 <b>Práctico 4:</b> Análisis conformacional de un oligosacárido utilizando espectroscopía de RMN y Modelado Molecular.
7	7/12	<b>Teórico 7:</b> Obtención, purificación y análisis fisicoquímico. <b>Seminarios.</b>