

Indice

Prefacio	i
1 Interacción Radiación-Materia	3
2 Efecto Raman	17
3 Proteínas	25
4 Introducción	37
5 Estudios anteriores	45
6 Experimentos	53
6.1 Hemoglobina liofilizada	53
6.2 Experimentos ópticos	56
7 Cálculos	73
7.1 Cálculo de densidad electrónica	75
7.2 Cálculo de energía total electrónica	78
8 Discusión y conclusiones	81
9 Introducción	85
10 Antecedentes	89

Prefacio

En este informe se describirán brevemente dos trabajos realizados durante el Trabajo Especial (TE). Los mismos son fundamentalmente estudios básicos acerca de propiedades físicas de proteínas globulares. En el primero de ellos, se estudió la dinámica de desoxigenación parcial reversible de hemoglobina inducida por la incidencia de luz láser de potencia continua. Dicho estudio fue encarado tanto desde un punto de vista experimental, utilizando básicamente técnicas ópticas, como teórico, realizando cálculos electrónicos semiempíricos.

En el segundo trabajo, por el contrario, se estudió la dinámica de vibraciones de bajas frecuencias de proteínas globulares, para lo cual se implementó un nuevo modelo teórico. El análisis fue realizado utilizando técnicas computacionales.

En la primera sección, compuesta por tres capítulos, se dará una introducción teórica breve y general sobre los fenómenos de luminiscencia y absorción de luz, el efecto Raman y proteínas. En la segunda sección se describirá el estudio de desoxigenación de Hemoglobina inducida por luz. Adicionalmente, en la tercer sección se describirá el estudio de la dinámica de vibraciones a bajas frecuencias en proteínas globulares.

Finalmente, en el único Apéndice se presentan las versiones en inglés de los trabajos descriptos, y adicionalmente dos estudios que también fueron realizados en el marco del TE, pero que por cuestión de espacio no fueron incluidos en el informe del mismo.