

# Índice

<b>Capítulo 1: Introducción</b>	1
1.1. Aspectos teóricos	3
1.1.1. Procesos fotoinducidos	6
<i>Transferencia electrónica de energía (TE<sub>n</sub>)</i>	7
<i>Transferencia de electrones (TE) y formación de excíplejos (EX)</i>	9
<i>Transferencia de protón fotoinducida (TP)</i>	10
<i>Formación de excímeros (EXC)</i>	10
1.2. Interacción anfitrión-huésped	11
<i>Reconocimiento molecular y selectividad</i>	13
<i>Constantes de unión</i>	14
<i>Procesos fotoquímicos</i>	14
<i>Fotorreactividad en albúminas séricas</i>	15
1.3. Proteínas	17
1.3.1. Albúminas séricas de distintas especies	22
1.3.2. Función de la albúmina sérica	23
1.3.3. Estructura general de la albúmina sérica	25
1.3.4. Interacción con sustratos	27
1.4. Ligandos	30
1.4.1. Fármacos	31
1.4.2. Metabolitos	34
1.4.3. Otros ligandos	36
1.5. Análisis de proteómica	39
1.6. Cálculo teórico	41
1.6.1. MD y computacional	41
1.6.2. Acoplamiento molecular (docking)	43
1.6.3. Simulaciones de dinámica molecular	43
<b>Capítulo 2: Objetivos</b>	45
<b>Capítulo 3: Identification of a common recognition center for a photoactive non-steroidal antiinflammatory drug in serum albumins of different species</b>	49
3.1. Abstract	51
3.2. Introduction	52
3.3. Results and discussion	55

3.3.1. Dark binding interactions in CPF/SA complexes	55
3.3.2. Covalent drug-protein photobinding	60
3.3.3. Molecular modelling studies	65
3.3.4. Binding to “V” cleft pocket	67
3.3.5. Binding to sub-domain IB	73
3.4 Conclusions	75
3.5 Experimental	77
3.6 Supplementary material	80
3.7 References	116
<b>Capítulo 4: Photobinding of triflusal to human serum albumin investigated by fluorescence, proteomic análisis and computational studies</b>	123
4.1. Abstract	125
4.2. Introduction	126
4.3. Results and discussion	129
4.3.1. Fluorescence detection of covalent HTB photoadducts to HSA.	129
4.3.2. Determination of the modified amino acid residues by proteomic analysis	130
4.3.3. Computational studies to elucidate the HTB binding mode	134
4.4 Conclusions	140
4.5 Experimental	140
4.6 Supplementary material	147
4.7 References	154
<b>Capítulo 5: Photogeneration of quinone-methides as latent electrophiles for lysine-targeting</b>	163
5.1. Abstract	165
5.2. Introduction	166
5.3. Results and discussion	170
5.3.1. Photophysical detection of a complex between trifluoromethylphenols <b>1</b> and <b>2</b> and HSA	170
5.3.2. Photobinding of <b>1</b> and <b>2</b> to HSA	178
5.3.3. Docking and Molecular Dynamics Simulations Studies	183
5.4 Conclusions	196
5.5 Experimental	198

5.6 Supplementary material	205
5.7 References	208
<b>Capítulo 6: Conclusiones</b>	<b>221</b>
<b>Capítulo 7: Resúmenes</b>	<b>225</b>
<b>Capítulo 8: Congresos &amp; Publicaciones</b>	<b>237</b>