

Desarrollo de una herramienta espectroscópica para el estudio de sistemas ligando-proteína usando 2D-COS FTIR

PROBLEMA

Las instituciones académicas y de investigación con presupuestos limitados enfrentan dificultades para acceder a tecnologías avanzadas necesarias para estudiar las modificaciones estructurales de proteínas en condiciones patológicas.



Equipo de Resonancia Magnética Nuclear

Costo: ~ \$500.000

OBJETIVO GENERAL

Desarrollar una aplicación de software libre en lenguaje Python para el análisis estructural de sistemas proteína-ligando mediante el uso de correlación espectroscópica bidimensional.

PROPUESTA

Combinar técnicas convencionales de espectroscopía (más económicas), con correlación espectroscópica bidimensional (2DCOS), para obtener espectros bidimensionales que ofrecen información más detallada y que permiten estudiar las proteínas a profundidad.

Equipo IR convencional
Costo: ~ \$20.000



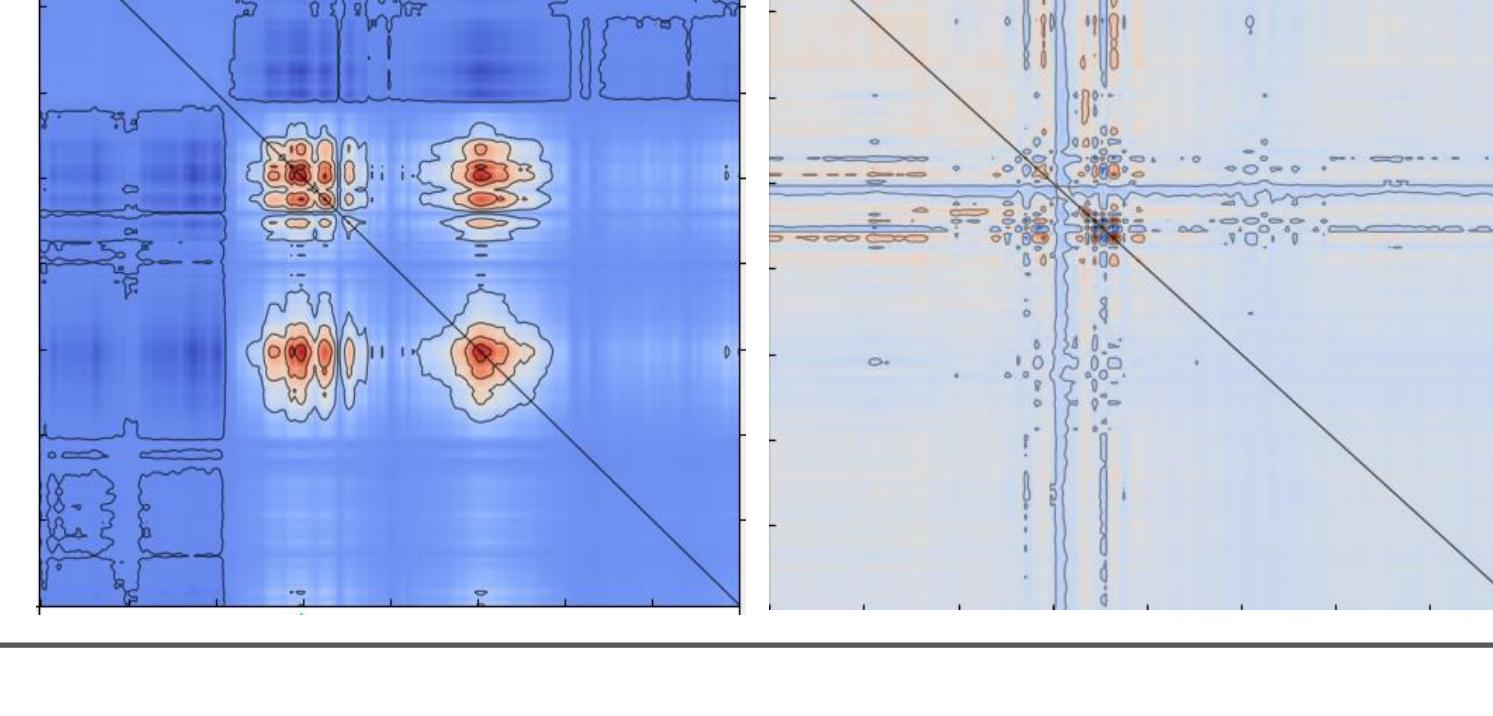
Procesamiento Matemático

2D Correlation Spectra

$$\Phi(v_1, v_2) = \frac{1}{m-1} \sum_{i=1}^m \tilde{A}(v_1, s_i) \cdot \tilde{A}(v_2, s_i)$$

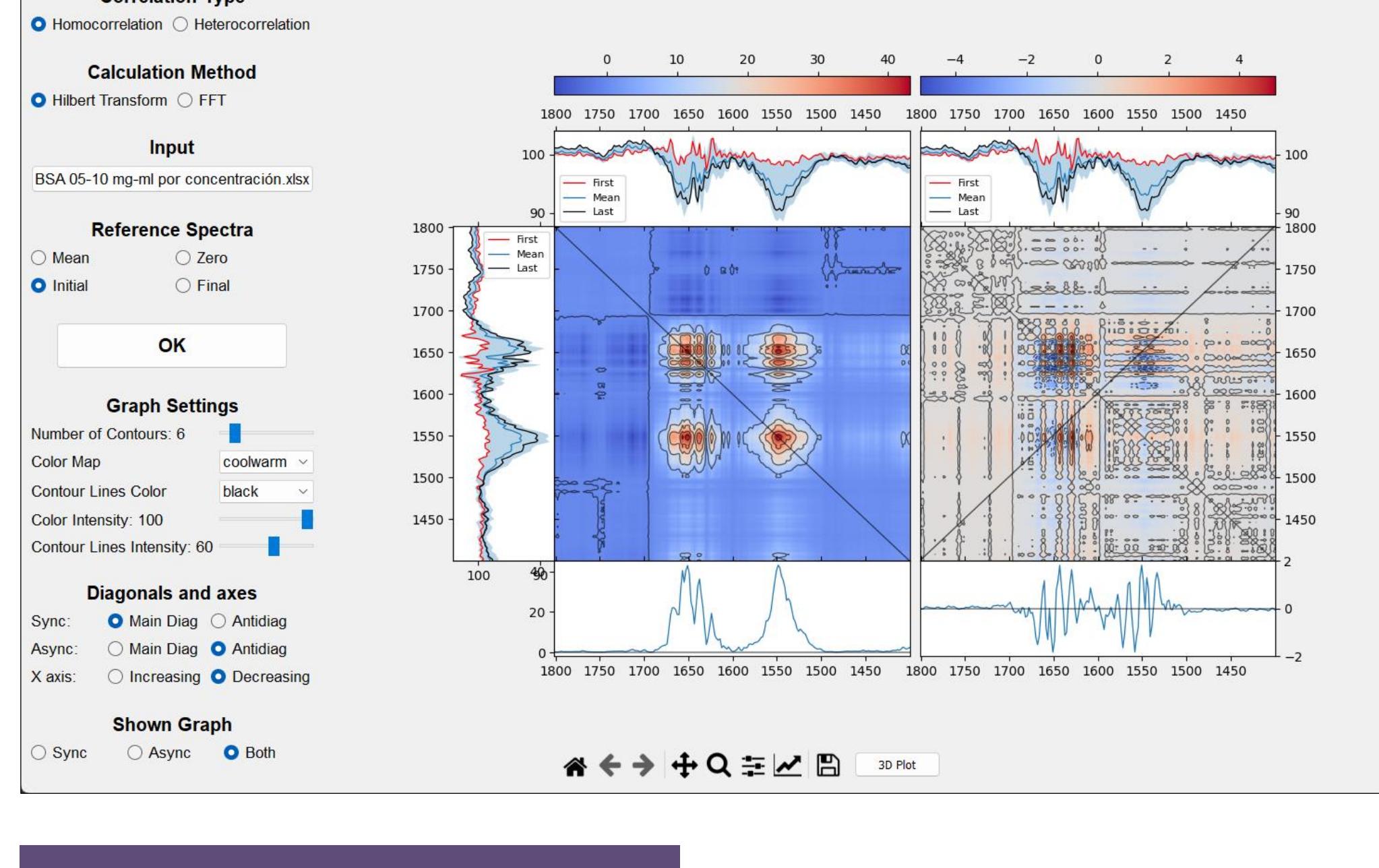
$$\Psi(v_1, v_2) = \frac{1}{m-1} \sum_{i=1}^m \tilde{A}(v_1, s_i) \cdot \sum_{j=1}^m N_{i,j} \cdot \tilde{A}(v_2, s_j)$$

$$|\Lambda(v_1, v_2)| = \sqrt{\Phi(v_1, v_1) \cdot \Phi(v_2, v_2) - \Phi(v_1, v_2)^2}$$

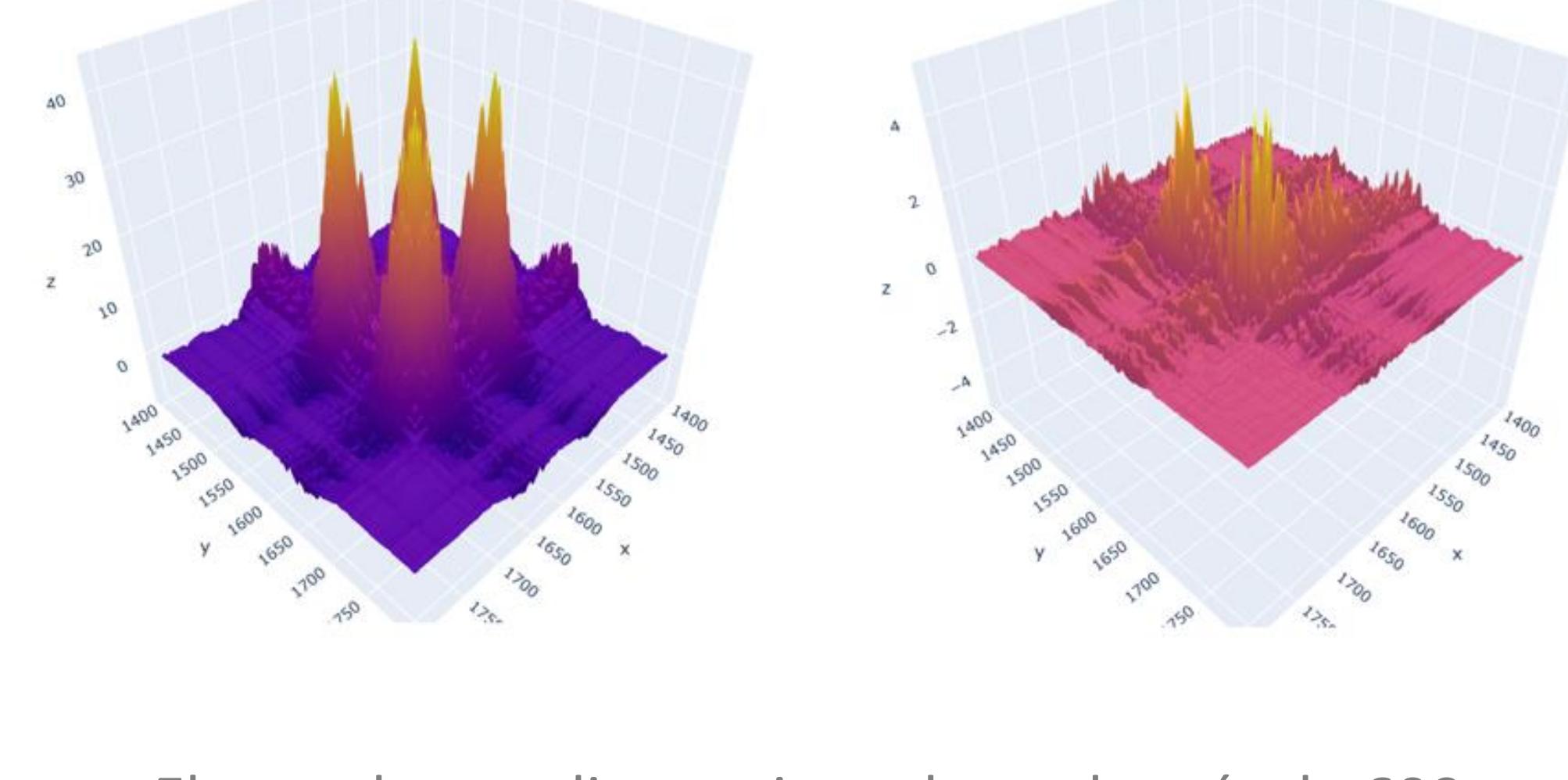


RESULTADOS

Herramienta Informática para 2DCOS



Caso de estudio (BSA + Glucosa + Metformina)



El caso de estudio contiene datos de más de 600 mediciones de IR

CONCLUSIONES

- Se desarrolló una aplicación que genera espectros de 2DCOS, siendo así un método alternativo al uso de tecnología avanzada.
- La aplicación permitió determinar cambios estructurales y conformacionales en la proteína que no se hubieran podido observar aplicando espectroscopía infrarroja simple.
- Se probó la aplicación en un sistema de BSA + Glucosa + Metformina, y se obtuvieron resultados congruentes con investigaciones que utilizan técnicas avanzadas.