

# 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.

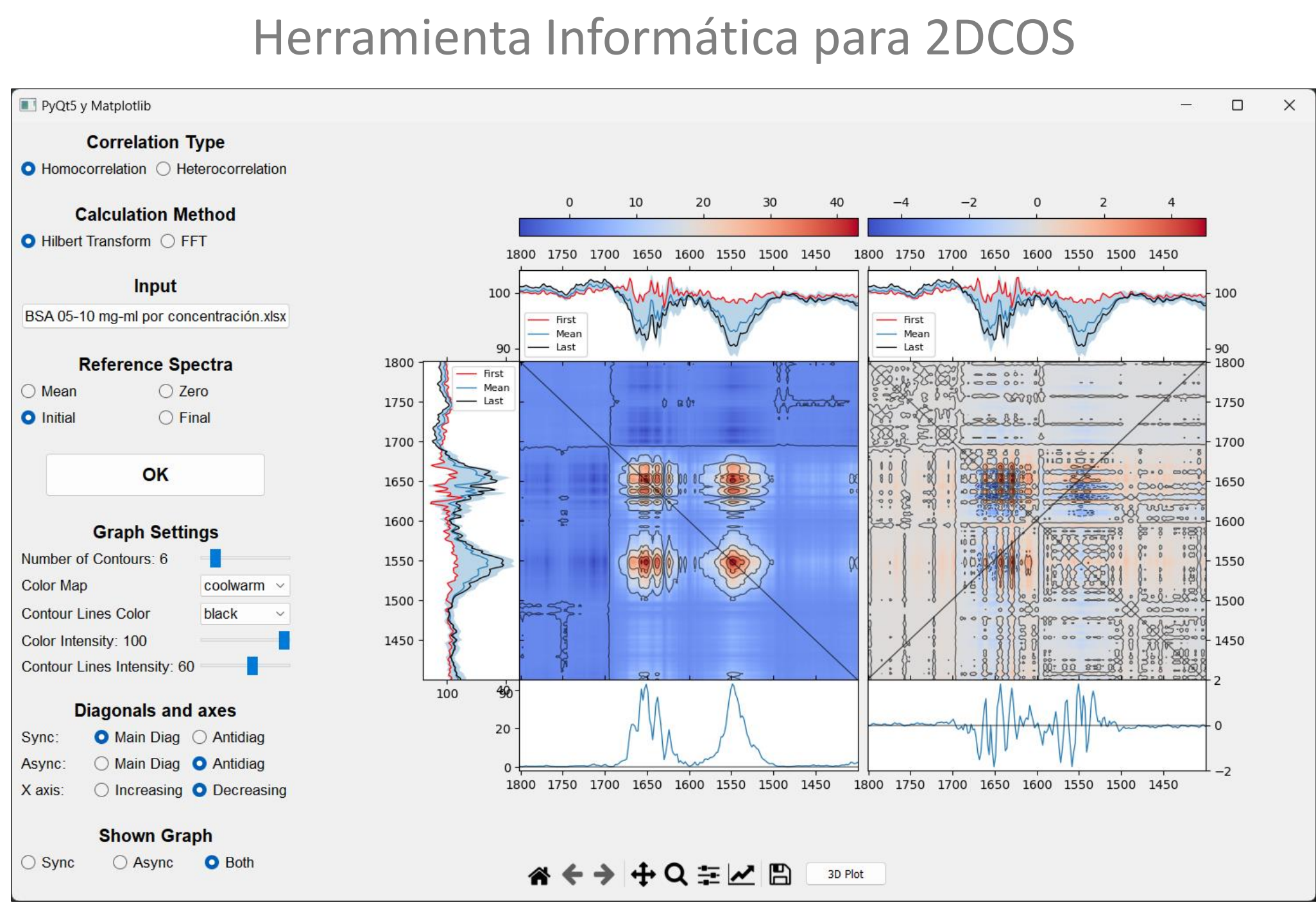
## OBJETIVO GENERAL

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

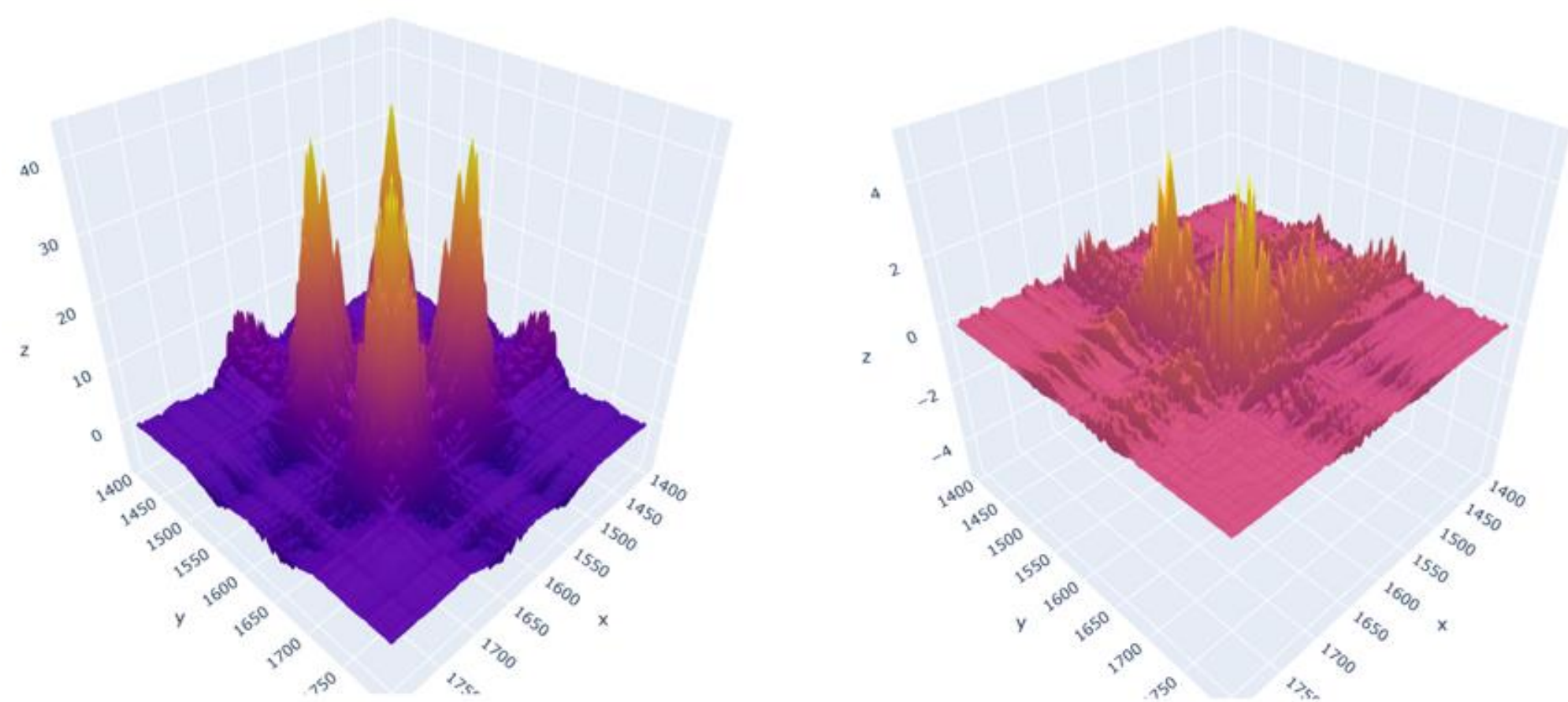
## PROPUESTA

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.

## RESULTADOS



### 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.
- Se probó la aplicación en un sistema de BSA + Glucosa + Metformina, y se obtuvieron resultados congruentes con investigaciones que utilizan técnicas avanzadas.
- La aplicación permitió determinar cambios estructurales y conformacionales en la proteína que no se hubieran podido observar aplicando espectroscopía infrarroja simple.