

Diseño de una estrategia espectroscópica para el estudio de mecanismos de reacción en sistemas biológicos.

PROBLEMA

La glicación no enzimática de proteínas, un proceso relacionado con el desarrollo de enfermedades crónicas, es difícil de estudiar debido a las limitaciones de las técnicas tradicionales como FTIR, que no logran detectar con precisión los cambios conformacionales y dinámicas proteicas en sistemas complejos. Aunque el análisis 2DCos mejora la capacidad de observación, su efectividad depende del tratamiento adecuado de los datos y de herramientas adicionales como métodos estadísticos, necesarios para mejorar la calidad espectral y extraer información significativa.

OBJETIVO GENERAL

Desarrollar una estrategia de análisis de datos espectroscópicos para sistemas biológicos complejos utilizando la herramienta Py2DCos-FTIR.

PROPUESTA

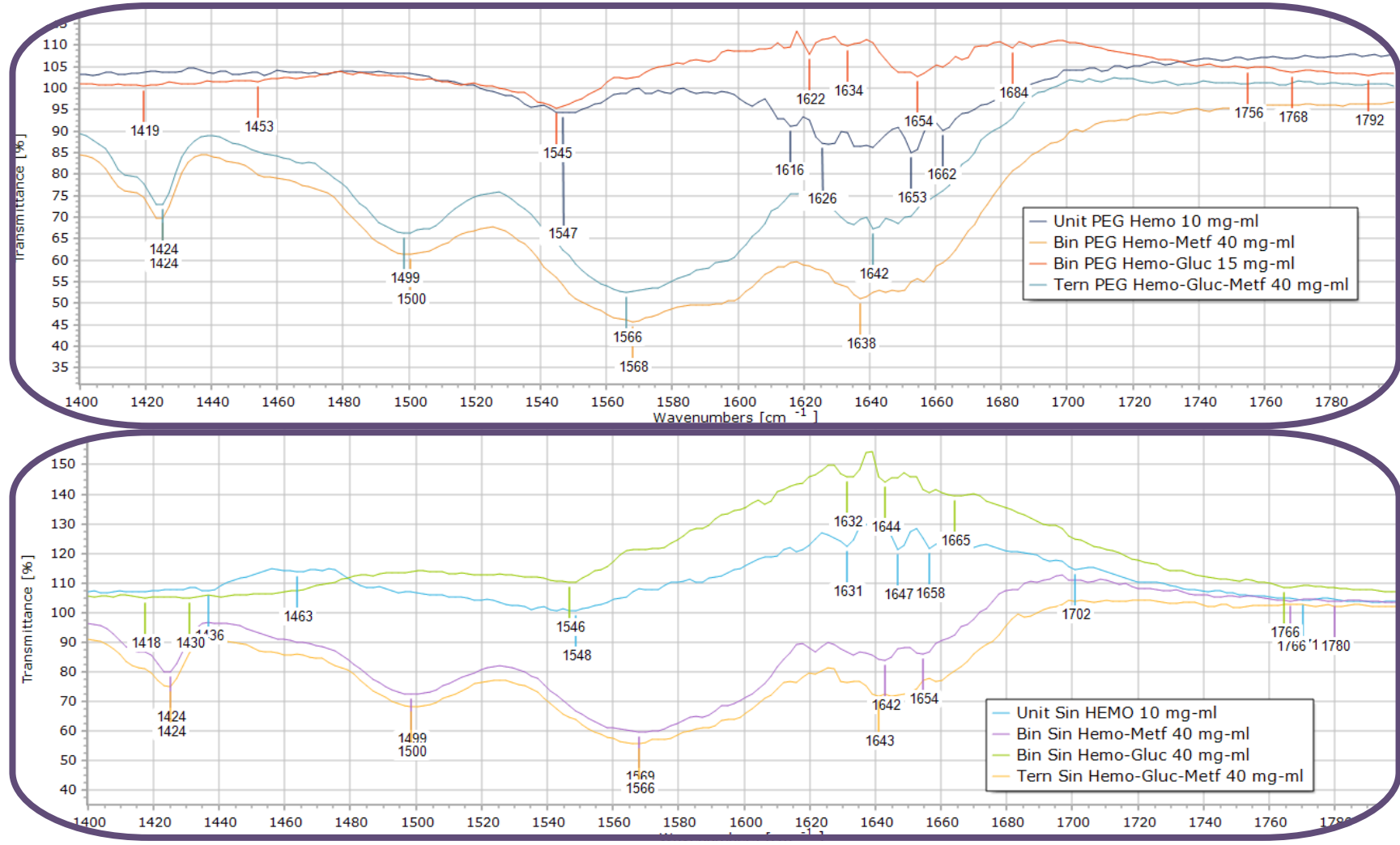
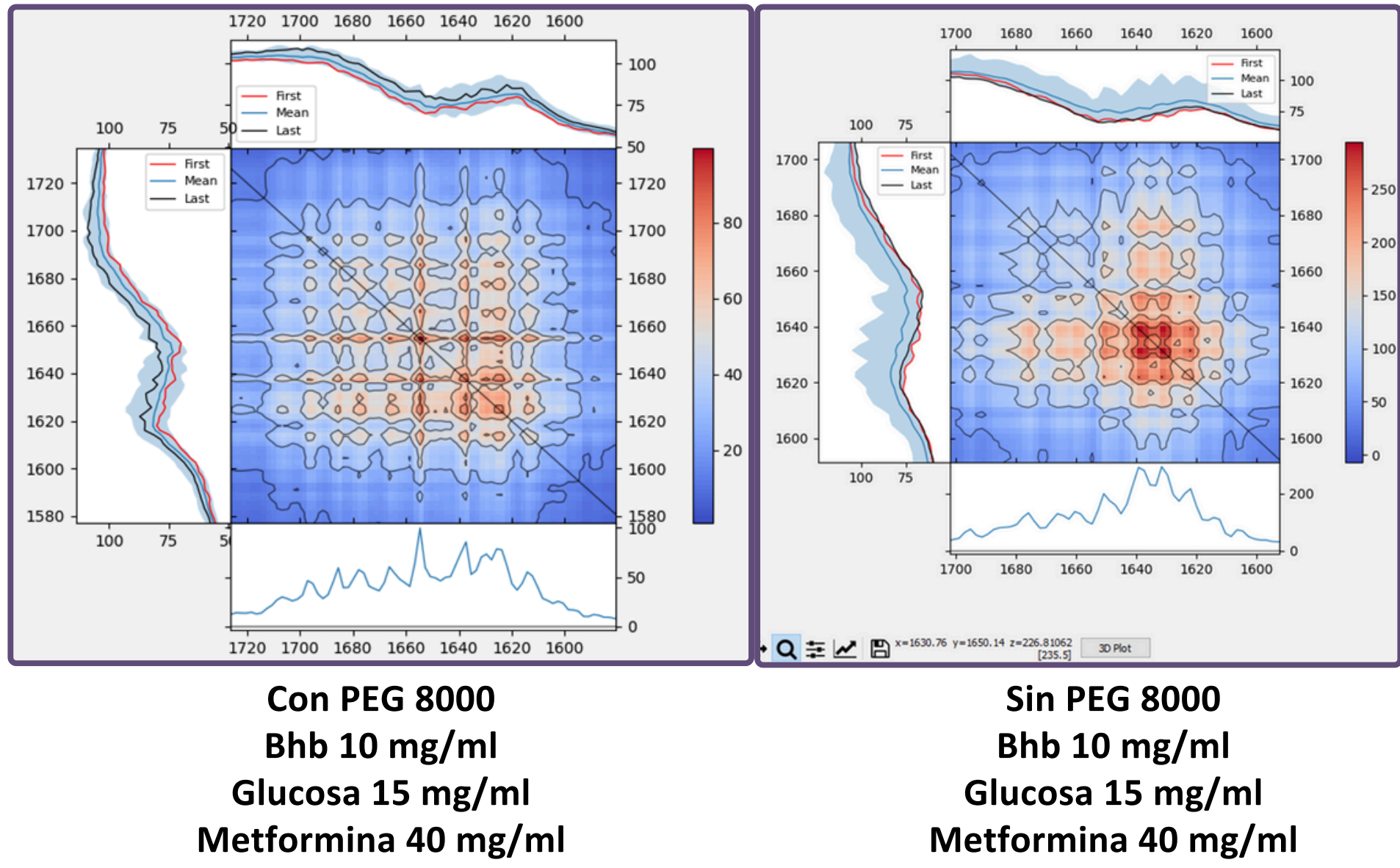
Desarrollar una estrategia basada en métodos estadísticos, como el análisis de componentes principales (PCA), para identificar las frecuencias de onda más relevantes en sistemas biológicos complejos. Este enfoque permitirá enfocar el análisis en las perturbaciones más significativas, las cuales no son evidentes a simple vista debido a la complejidad de los sistemas. A partir de los resultados obtenidos con el PCA, se analizarán los espectros FTIR y el análisis bidimensional de correlación espectroscópica (2DCOS) en los puntos clave indicados, facilitando la interpretación de los cambios que ocurren en los sistemas a estudiar.



RESULTADOS



Sin PEG				Con PEG			
Sistema	Frecuencias de onda más relevantes	Carga	Grupo funcional o Estructura	Sistema	Frecuencias de onda más relevantes	Carga	Grupo funcional o Estructura
Binario Bhb-Glucosa	1629-1649	25	Hélices alfa	Binario Bhb-Glucosa	1629-1649	18	Hélices alfa
Binario Bhb-Metformina	1560-1580	65	N-H	Binario Bhb-Metformina	1560-1570	61	N-H
Ternario Bhb, Gluc, Metf	1560-1580	62	N-H	Ternario Bhb, Gluc, Metf	1560-1575	63	N-H



CONCLUSIONES

Se desarrolló una estrategia eficaz para identificar las frecuencias de onda más relevantes en cada sistema estudiado, lo que facilitó una interpretación más rápida y precisa de los datos obtenidos mediante PCA. Al validar los resultados con la literatura y el análisis del mapa de correlación bidimensional, se observó que la glucosa alteraba significativamente la estructura de la proteína, favoreciendo la reacción de glucosilación no enzimática. Sin embargo, al agregar metformina, la proteína conservó su estructura original, inhibiendo este proceso. Esta estrategia no solo permitió confirmar estos hallazgos, sino que también optimizó el tiempo de análisis al centrarse únicamente en las perturbaciones más significativas, proporcionando un enfoque más eficiente y dirigido para el estudio de sistemas biológicos complejos.