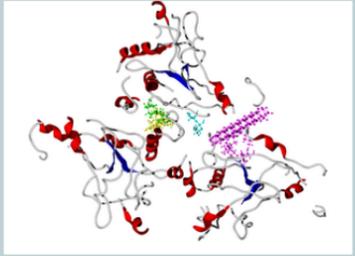




Diseño de biosensores para *Fusarium oxysporum* basados en fibras ópticas funcionalizadas

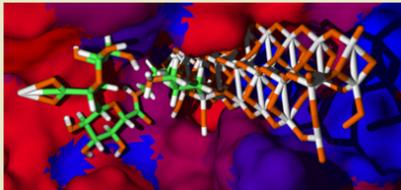
Acoplamiento molecular



Herramienta para predecir energía de enlace entre ligando y blanco

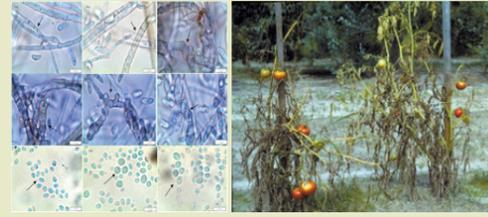
Introducción

Sensores basados en OF son de gran ayuda para detectar parámetros bioquímicos



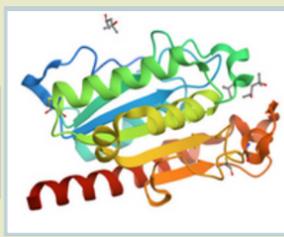
Fibra óptica

Fusarium oxysporum



Agente causal de marchitez vascular y pudrición de raíz

Cutinasa



Enzima de *F. oxysporum*, capaz de degradar la pared celular vegetal.

Metodología

01

Método Docking Molecular

Entre ligando (OF, pesticidas) y blanco (proteína, nanopartículas)

02

Blanco

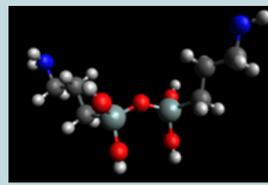
Proteína cutinasa con código 5AJH se descargó de Protein Data Bank



03

Ligandos

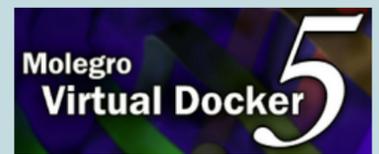
Modelados por medio del software Avogadro



04

Acoplamiento Molecular

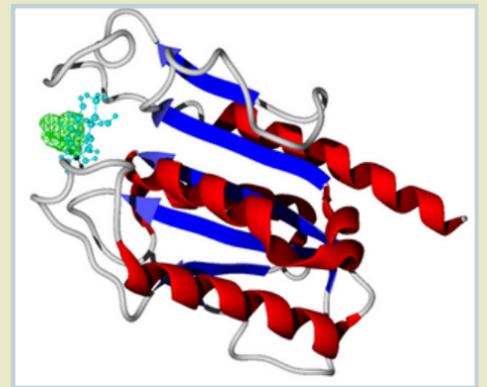
A través de Molegro Virtual Docker (MVD)



Resultados

Interacciones ligando-blanco

Se determinó que el PVA es el ligando más efectivo para la interacción con la proteína cutinasa de *F. oxysporum*.



Valores de acoplamiento molecular ligando-blanco

Molécula	E (kcal/mol)	LE (kcal/mol)
Fibra-APTES-alginato	624.15	4.66
APTES	-86.25	-5.75
Alginato	-57.06	-2.28
PVA	-94.49	-5.91

Se observa que el PVA presenta la menor eficiencia de ligando (LE) de -5.91 kcal/mol, lo que confirma que esta interacción es la más efectiva.

Conclusión

Con los resultados obtenidos se demuestra la efectividad de los ligandos en la interacción con la cutinasa de *F. oxysporum*. Además, la funcionalización de fibras ópticas puede extenderse a otros campos, como la detección de contaminantes en alimentos y agua, el monitoreo de la salud ambiental y el desarrollo de dispositivos médicos para la detección de biomarcadores en enfermedades humanas.

