

Abordagem Computacional sobre Sistemas Baseados em DNA: Da Adsorção em Membranas ao Desenvolvimento de Veículos para Transporte e Entrega de Fármacos

>

Vasco Bonifácio

vasco.bonifacio@tecnico.ulisboa.pt

• • •

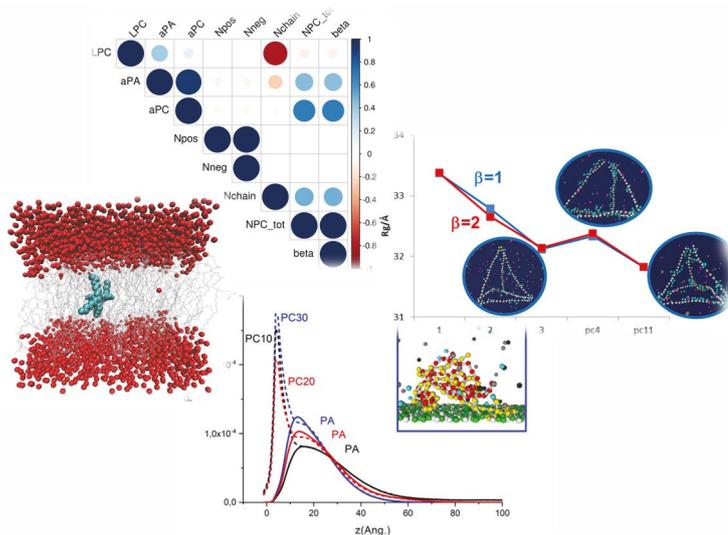
O *design* de sistemas para transporte e entrega de fármacos e/ou material genético tem sido um aspeto amplamente escrutinado nos últimos anos e que continua a ser alvo de intensa pesquisa. O objetivo deste projeto é desenvolver transportadores que venham a ser clinicamente relevantes para combater doenças elusivas como o cancro, Alzheimer, infeções por bactérias multirresistentes, entre outros, recorrendo a tecnologias moleculares baseadas em ácidos nucleicos (DNA e RNA).

Um dos passos-chave em todo o processo é a interação destes sistemas de polieletrólitos com as barreiras celulares. Neste sentido, o estudo da interação entre polieletrólitos e membranas modelo é um assunto da maior relevância, não só para o desenvolvimento de transportadores eficientes como na interpretação de

processos relacionados com a adsorção de proteínas, agregação coloidal e muitos outros.

A simulação computacional é amplamente reconhecida como uma ferramenta poderosa para explorar diferentes aspetos com impacto no desenvolvimento e comportamento destes sistemas, uma vez que abordagens sistemáticas são muitas vezes difíceis de realizar experimentalmente. Este tem sido um dos focos desta equipa de investigação, que recorrendo à simulação *coarse-grained* e atomística pretende a interpretação e *design* de sistemas de poliplexos para entrega genética, o desenvolvimento de nanossistemas direcionados ao tratamento da desordem do olho seco e a tumores cerebrais, com particular enfoque no glioblastoma, e em transportadores do tipo DNA-origami para o combate à resistência microbiana.

• • •



>

Ficha Técnica do Projeto

Alberto Canelas Pais

Financiamento: Coimbra Chemistry Centre (CQC) – UIDB/00313/2020

Equipa: CQC/Universidade de Coimbra – Alberto Canelas Pais (IR), Sandra Nunes, Tânia Cova, Carla Vitorino, Maria Mendes, João Basso.