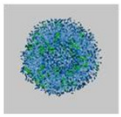
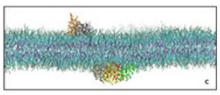
SIMULACIONES COMPUTACIONALES PARA EL ESTUDIO DE MATERIALES BIOCOMPATIBLES PARA NANO-ENCAPSULACIÓN DE FÁRMACOS Y BICAPAS LIPÍDICAS EN PRESENCIA DE PEPTIDOS Y PROTEINAS

Grupo de nanomedicinas computacional

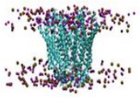
Líneas de trabajo del grupo



Nano encapsulación de fármacos



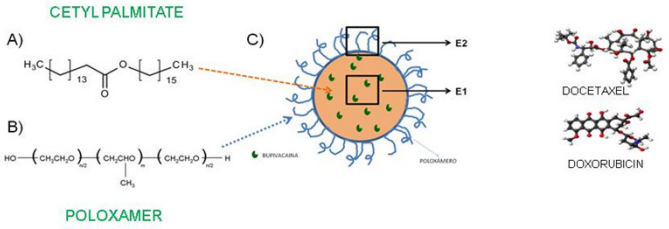
Interacción de fármacos y péptidos con membranas



Proteínas de membranas

Nanopartícula lipídica sólida para encapsular fármacos anticancerígenos

Tesis: Juan Albano (jmra88@gmail.com)

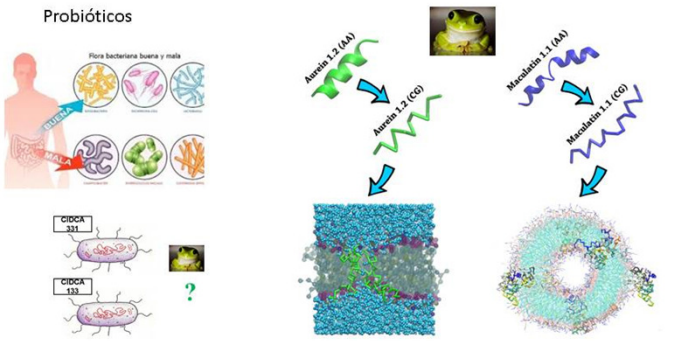


E1- Simulaciones de Dimámica Molecular a nivel atomístico
E2- Simulaciones de Dinámica Molecular a nivel Grano grueso

- I. Wood, J.M.R. Albano, M.L. Cuestas, V.L. Mathet and M. Pickholz, Journal of Molecular Structure,1109, 106 (2016).
- "Development of a Polymer-Lipid Nanoparticle for the delivery of Docetaxel" J.M.R. Albano (en preparación)

Interacción de péptidos antimicrobianos con estructuras lipídicas

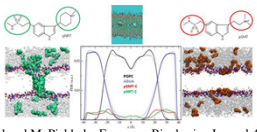
Tesis: Galo Balatti (gebalatti@gmail.com)



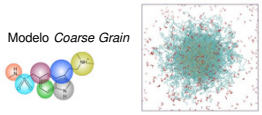
G. E. Balatti , E.E. Ambroggio, G.D. Fidelio, M. F. Martini and M. Pickholz, *Molecules* 2017, 22(10), 1775

Temas para tesis de Licenciatura y Doctorado

Triptanos: interacción con membranas y encapsulación



Modelo *Coarse Grain*

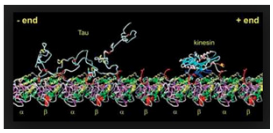


- I. Wood and M. Pickholz, European Biophysics Journal 42, 833-841 (2013)
- I. Wood and M. Pickholz, Journal of Molecular Modeling 20, 2463 (2014)
- I. Wood and M. Pickholz , J. Mol. Model. 22, 221 (2016)
- "A Sumatriptan Coarse Grain Model to Explore Different Environments: Interplay with Experimental Techniques" I. Wood, J.M.R Albano, P.L.O. Filho, V.M. Couto, M.A. de Farias, R.V. Portugal, E. de Paula,C.L.P. Oliveira and M. Pickholz (enviado)

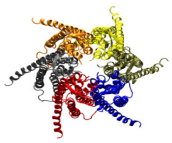
Estudio computacional multi-escala de mecanismos asociados a motores moleculares

Se postula que algunas patologías neurodegenerativas podrían estar asociadas a defectos en el anclaje o distribución de la proteína Tau y a su interacción con microtúbulos.

Colaboración: Luciana Bruno (IFIBA)



Estudio molecular de las uniones GAP mediante simulaciones computacionales



Las uniones de tipo GAP, presentes en la mayoría de los tejidos animales, tienen función tanto estructural como de canal (comunicando células adyacentes).

Colaboración: Marta Ferraro (IFIBA)

Estudios preliminares:Tesis de licenciatura de Nahuel Mussini ("Molecular Dynamics Study of Connexin Cx26 Hemichannel: Probing Calcium Binding Sites at High Concentrations" N. Mussini, J.M.R. Albano, R Toriano,J.C. Facelli, M. Pickholz and M.B. Ferraro)

Optimización de Nanopartículas Lipídicas Sólidas como Transportadores de Anestésicos Locales: un Abordaje Molecular

modelo de capas enriquecidas con fármacos

El objetivo general es el desarrollo racional de vehiculizadores de fármacos para su uso en el tratamiento del dolor del paciente oncológico.

Estructura de a) S-Bupivacaína y b) R-Bupivacaína.

Colaboración: Eneida de Paula
Laboratorio de Biomembranas- IB-UNICAMP (Brasil)

Contacto: Mónica Pickholz (mpickholz@df.uba.ar)