

Índice

Abstract	3
Resumen.....	4
1. Introducción	5
1.1. Cáncer.....	5
1.2. El Cáncer Colorrectal (CCR).	7
1.3. Tratamientos frente al cáncer a nivel general.	7
1.4. Nanotecnología y Nanomedicina.	10
1.5. Simulaciones de dinámica molecular.....	15
2. Hipótesis.....	20
3. Objetivos.	20
3.1. Objetivo general.....	20
3.2. Objetivos específicos.....	20
4. Materiales y métodos	21
4.1 Modelar polímeros representativos de PLA/PLGA, DSPE-PEG ₂₀₀₀ y moléculas farmacológicas.	22
4.1.1. Modelado y preparación de estructuras tridimensionales de polímeros y fármacos.	22
4.1.2. Parametrización de las estructuras generadas.	23
4.1.3. Estados de protonación de fármacos y biopolímeros.....	24
4.2. Generar modelos estructurales de nano-superficies poliméricas compuestas por PLGA/PLA: PEG, fármaco y/o biomarcador, incorporando DSPE-PEG conjugado con terminales COO, NH ₂ y OCH ₃ como primera capa.....	24
4.2.1. Crear configuraciones de estructuras iniciales para los sistemas a simular.	24
4.3 A Evaluar la estabilidad estructural de los complejos nano-superficie: droga previamente diseñados.	29
4.4. Estimar perfiles de fuerza asociados a la liberación de drogas anticancerígenas desde nanotransportadores poliméricos mediante cálculos de simulación molecular dirigida.	29
4.4.1. Extracción de drogas desde el interior de nanopartículas poliméricas a través de SMD	29
5. Resultados	32
5.1 Estados de protonación de fármacos y biopolímeros.....	32
5.2 Análisis de estabilidad estructural y compactación, para cada sistema generado.....	33
5.3 Extracción de drogas desde el interior de nanopartículas poliméricas a través de SMD.	37
5.4 Análisis de los efectos provocados por el paso de las drogas a través de los sistemas generados.....	42
6. Conclusiones.....	44
7. Bibliografía	46