

Proponowana tematyka doktoratu: Modelowanie komputerowe nośników leków o strukturze dendrymerów z rdzeniem węglowym i gałęziami z telomerowych fragmentów DNA.

Słowa kluczowe: nośniki leków, dynamika molekularna, nanorurki węglowe, fullereny, telomery, DNA, i-motif, G-quadruplex, energia swobodna

Cel projektu: Nośniki leków o strukturze dendrymerów stanowią ważny element tej technologii. Typowymi przedstawicielami tego typu układów są dendrymery typu PAMAM, których zasada działania opiera się na zjawisku pęcznienia i kurczenia struktury w zależności od pH środowiska. Celem badań będzie analiza na poziomie molekularnym układów o podobnej strukturze lecz wykorzystujących rdzeń zbudowany z krótkich fragmentów nanorurek węglowych lub fullerenów oraz telomerowych fragmentów DNA jako gałęzi dendrymeru. Oczekiwany rezultatem zastosowania takiej struktury będzie zwiększenie pojemności nośnika, wzrost wytrzymałości mechanicznej oraz zwiększenie czułości na czynnik wyzwalający czyli pH otoczenia. Przebadane będą różne rodzaje leków antynowotworowych, głównie pod kątem zmian energii swobodnej wiązania z nośnikiem.