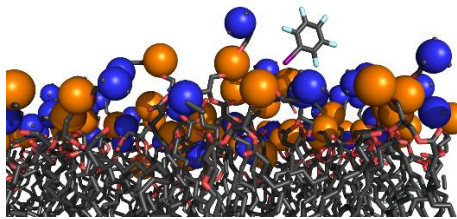


Título	Simulação molecular da permeabilidade de moléculas halogenadas através de membranas biológicas
Resumo	<p>Nos últimos anos, as empresas farmacêuticas têm vindo a investir cada vez mais em técnicas computacionais com vista à identificação e selecção de compostos com potencial terapêutico. No contexto de drug design, os halogéneos são usados em alguns compostos para preencher cavidades hidrofóbicas em proteínas alvo, melhorar a permeabilidade relativamente à barreira hematoencefálica ou facilitar a permeabilidade através de membranas. Além disto, os halogéneos podem estabelecer ligações não covalentes e direccionais do tipo R-X...B (X = Cl, Br, I; B = base de Lewis), denominadas ligações de halogéneo. Estas ligações são muito importantes em sistemas biológicos.[1]</p> <p>Este projecto tem como objectivo usar simulações de dinâmica molecular para estimar a permeabilidade de moléculas halogenadas com interesse terapêutico através de modelos de membranas biológicas. As simulações permitirão avaliar o efeito específico das ligações de halogéneo nessa permeabilidade e, potencialmente, contribuir para um design mais racional de fármacos. Os resultados deste trabalho, para além de serem compilados numa Tese, serão também usados para escrever um artigo científico a publicar em revista internacional.</p> <p>O uso de técnicas computacionais requer naturalmente motivação para o uso de meios informáticos e entusiasmo para trabalhar na área da modelação molecular e química computacional.</p>  <p>Referências [1] P. Auffinger <i>et. al.</i> <i>PNAS</i> 2004, 101, 16789.</p>
Local de trabalho	Grupo de Química Inorgânica e Teórica, CQB; CBS - Chemistry for Biological Systems, BioISI
Orientador (es)	Paulo Jorge Costa (8.5.53); Diogo Vila-Viçosa (8.5.53)
Informações	pjcosta@fc.ul.pt, diogo.vicosa@fc.ul.pt