

Título	Estudo <i>in silico</i> da introdução de um grupo acilo na estrutura de dendrímeros peptídicos com actividade anti-bacteriana
Resumo	<p>As bactérias multi-resistentes, tais como a <i>Pseudomonas aeruginosa</i> e a <i>Acinetobacter baumannii</i>, estão actualmente entre os patógenos humanos mais prevalentes, facto que já levou à Organização Mundial da Saúde a apelar por novos medicamentos antibióticos. Os dendrímeros peptídicos são estruturas ramificadas que através da multivalência conseguem exibir actividades antibióticas muito relevantes. Recentemente, no grupo dos nossos colaboradores (Profs. Reymond e Darbre, Univ. Bern, CH), uma série de dendrímeros peptídicos foram lipidados de modo a aumentar as suas lipofilicidades e actividades anti-bacterianas [1].</p> <p>Métodos computacionais de dinâmica molecular (MD) já mostraram que os dendrímeros peptídicos têm uma grande variedade conformacional [1,2]. Aqui, propomos o estudo do espaço conformacional de dendrímeros peptídicos lipidados, através de várias tarefas:</p> <p>1- Estudo conformacional por MD de dendrímeros peptídicos na presença e ausência do grupo lipídico.</p> <p>2- Estudo do efeito do pH na interacção dos dendrímeros lipidados com as bicamadas lipídicas.</p> <p>3- Compilar os resultados numa tese, usando a mesma informação para também escrever um artigo científico a publicar em revista internacional.</p> <p>[1] Siriwardena, T.N., Stach, M., He, R., Gan, B.-H., Javor, S., Heitz, M., Ma, L., Cai, X., Chen, P., Wei, D., Li, H., Ma, J., Köhler, T., van Delden, C., Darbre, T., Reymond, J.-L. (2018) J. Am. Chem. Soc., 140, 423.</p> <p>[2] Filipe, L. C. S., Machuqueiro, M., Baptista, A. M. (2011) J. Am. Chem. Soc., 133, 5042.</p>
Local de trabalho	CQB-FCUL (Edifício C8, sala 8.5.52)
Orientador (es)	Miguel Machuqueiro
Informações	Para mais detalhes e outros projectos: <a href="http://goo.gl/4taesN">goo.gl/4taesN</a>