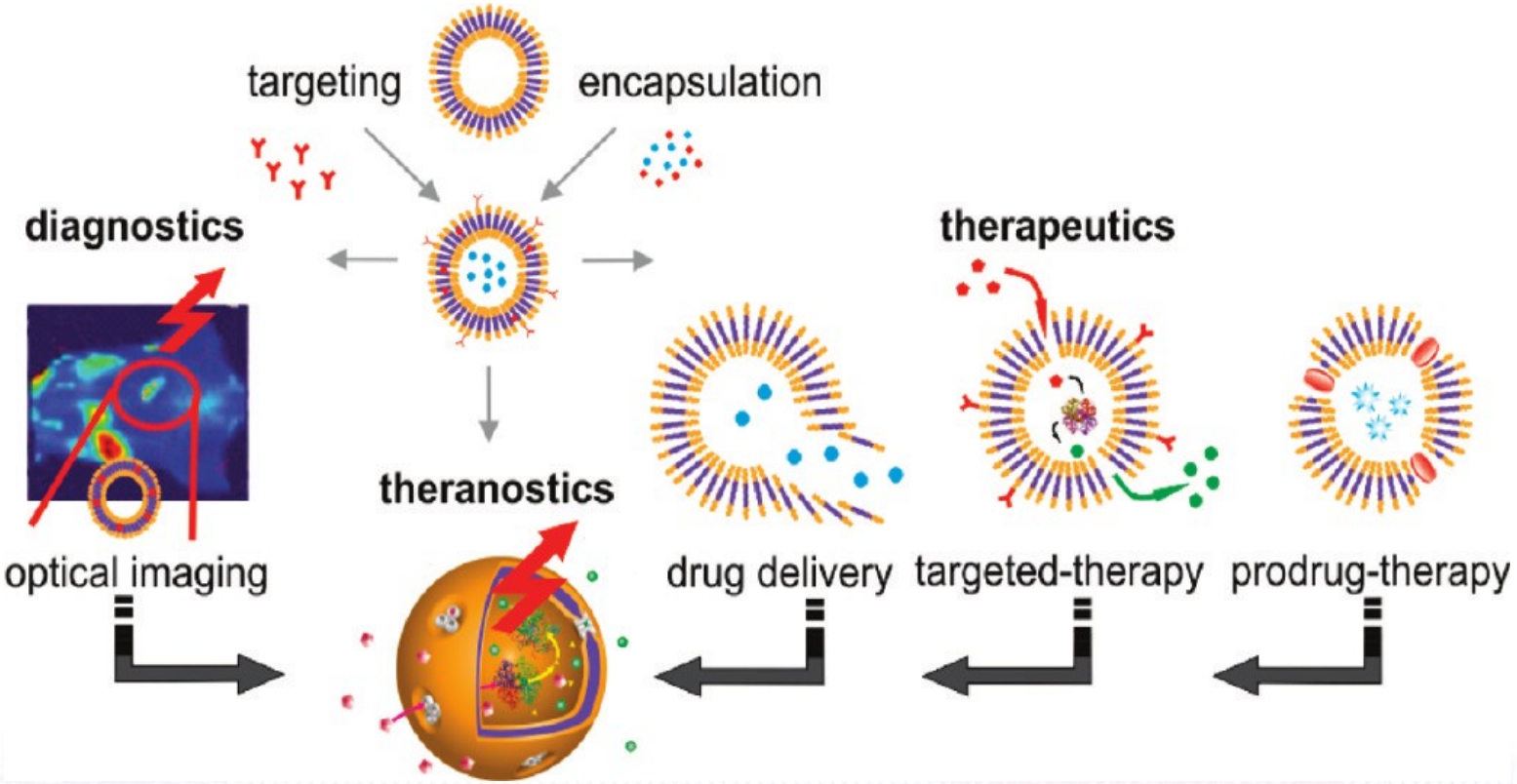
Diseño computacional de polimerosomas óptimos para aplicaciones en Nanomedicina

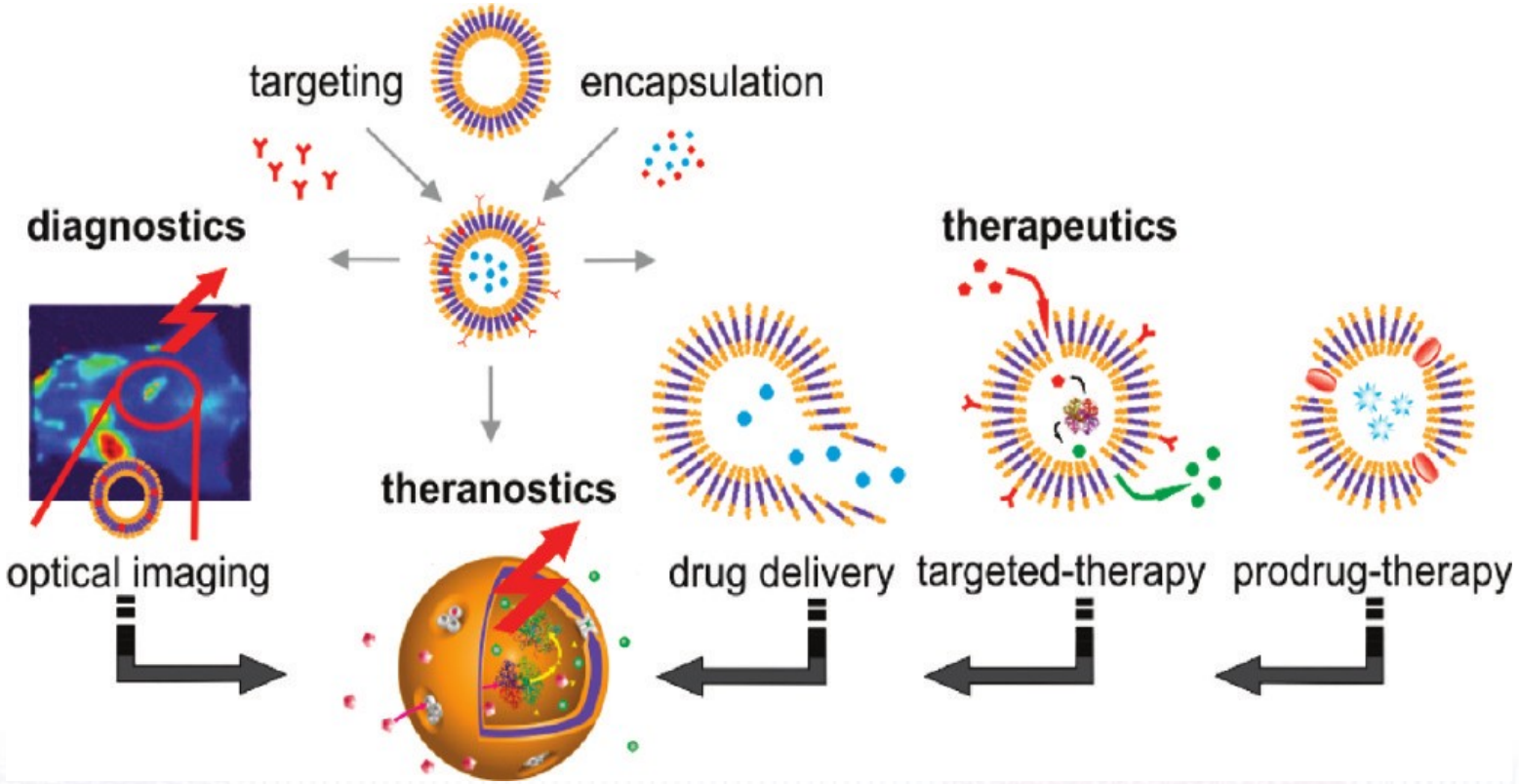
Becario: Damián A. Grillo

Directores: Marta B. Ferraro (DF), Esteban Mocskos (DC)

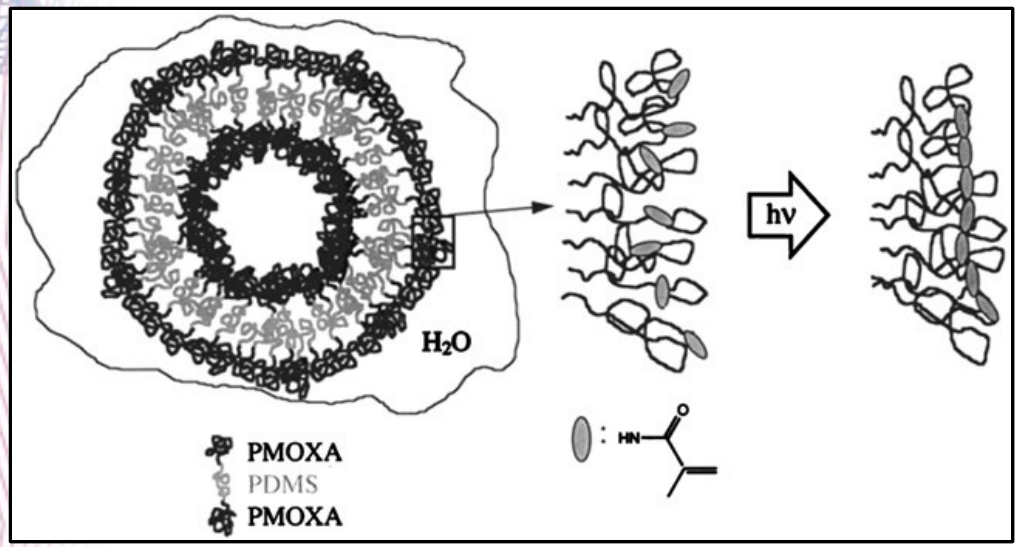


¿Qué son los polimerosomas? ¿Para qué sirven?

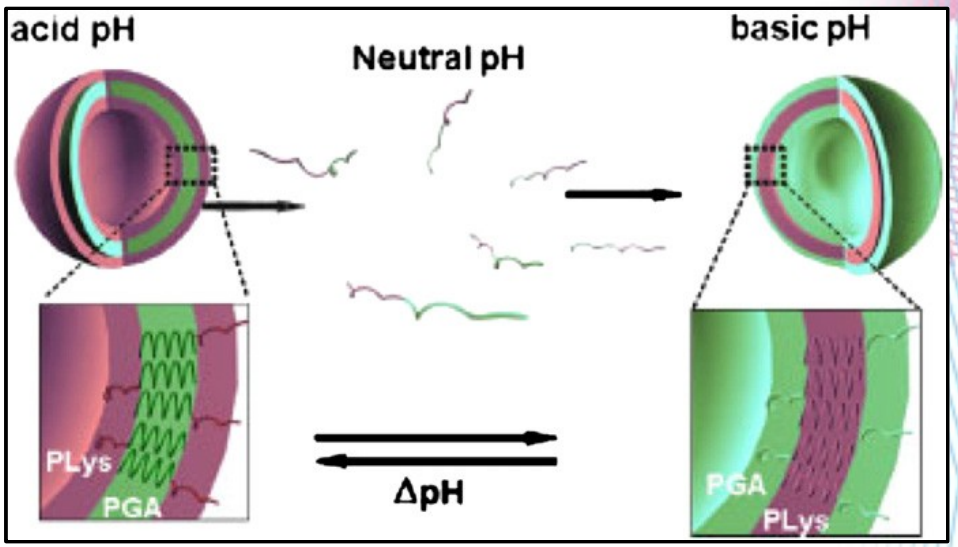
- **Polimerosomas:** Vesículas poliméricas artificiales.
- **Utilidad:** Encapsulamiento y transporte de diversas sustancias (drogas, proteínas, etc).
- **Aplicaciones biomédicas**: Administración de drogas, targeting de sustancias.



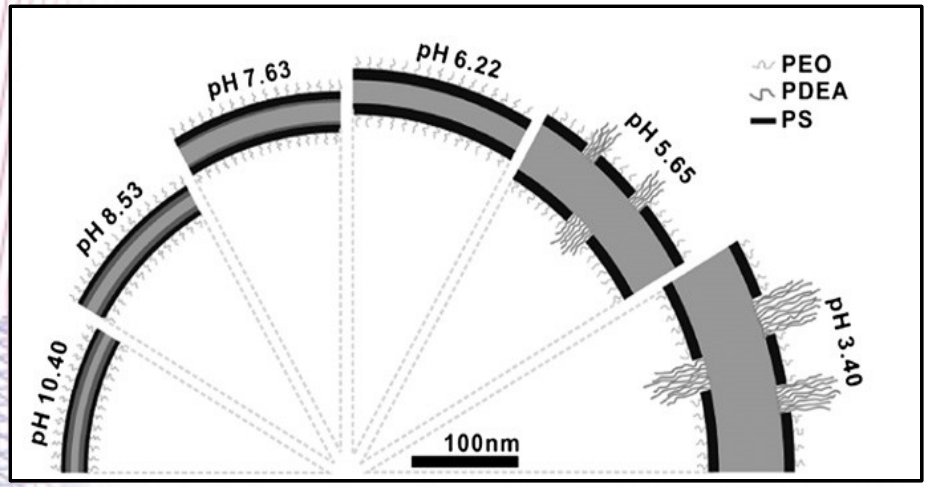
Polimerosomas sensibles a estímulos externos



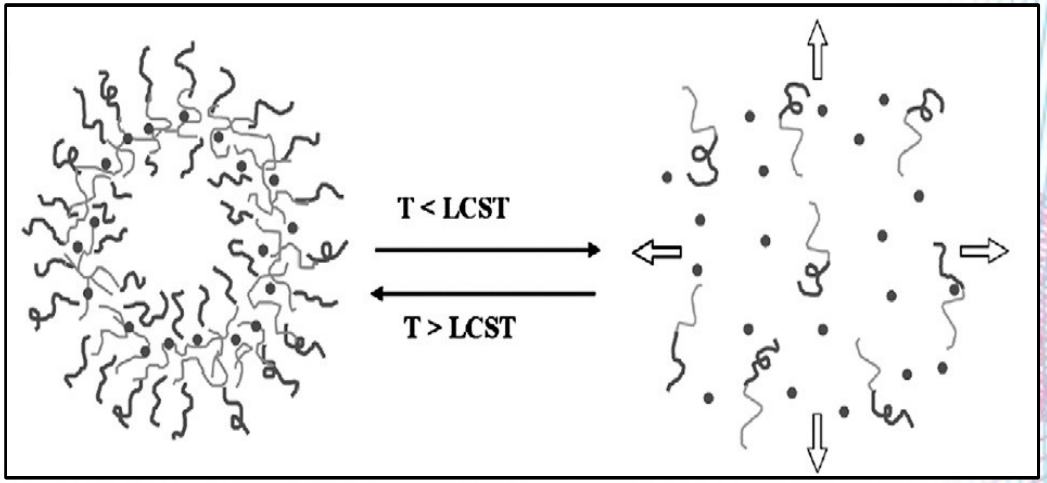
Cambios estructurales por radiación



Estructura dependiente del nivel de pH



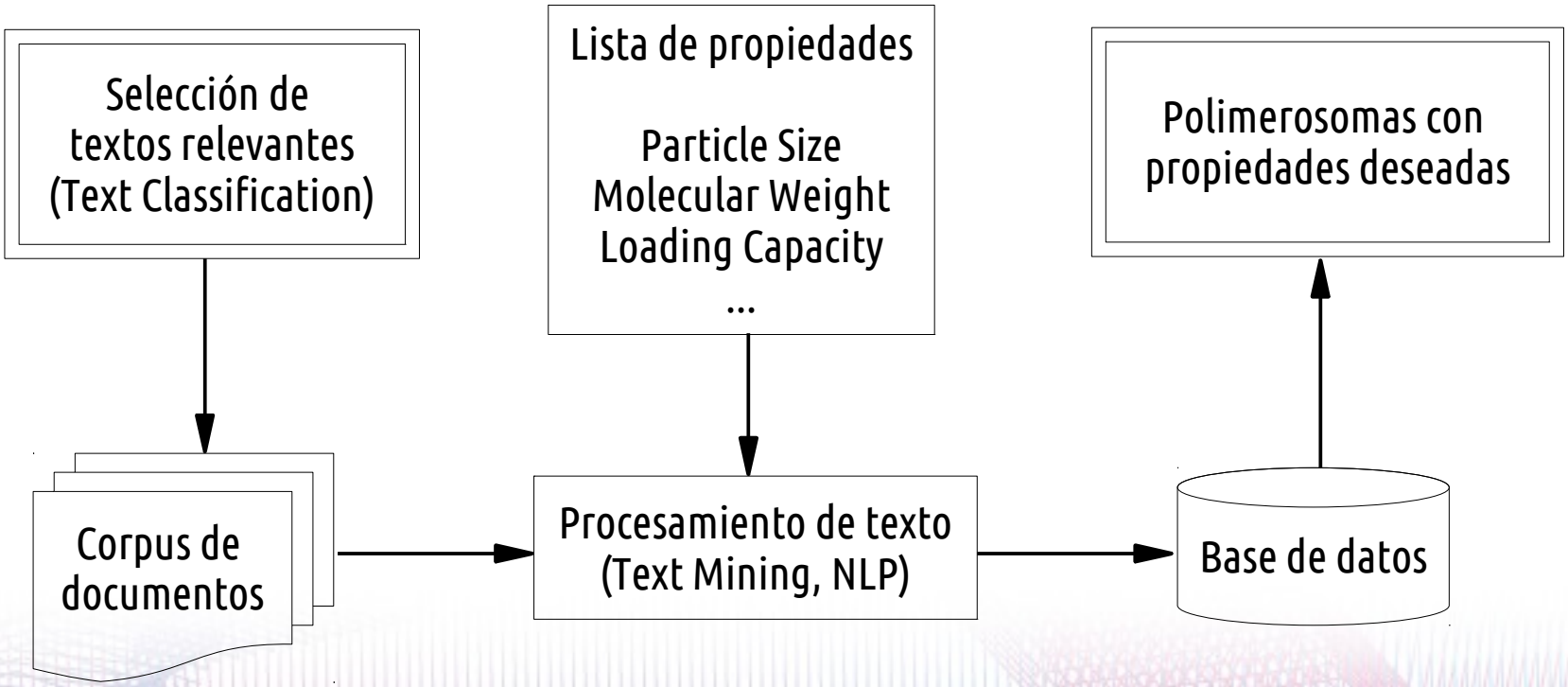
Tamaño dependiente del nivel de pH



Cambios estructurales por temperatura

Resumen del proyecto

- Dada cierta aplicación, ¿Qué sintetizar? ¿Cómo hacerlo? ¿Qué materiales?
- Gran volumen de información disponible. Búsqueda manual ineficiente.
- **Objetivos:** Desarrollar un esquema computacional para diseño eficiente de polimersomas utilizados en aplicaciones biomédicas.
- **Metodología:** Extracción automatica de datos relevantes + Simulaciones



Resultados preliminares - GATE