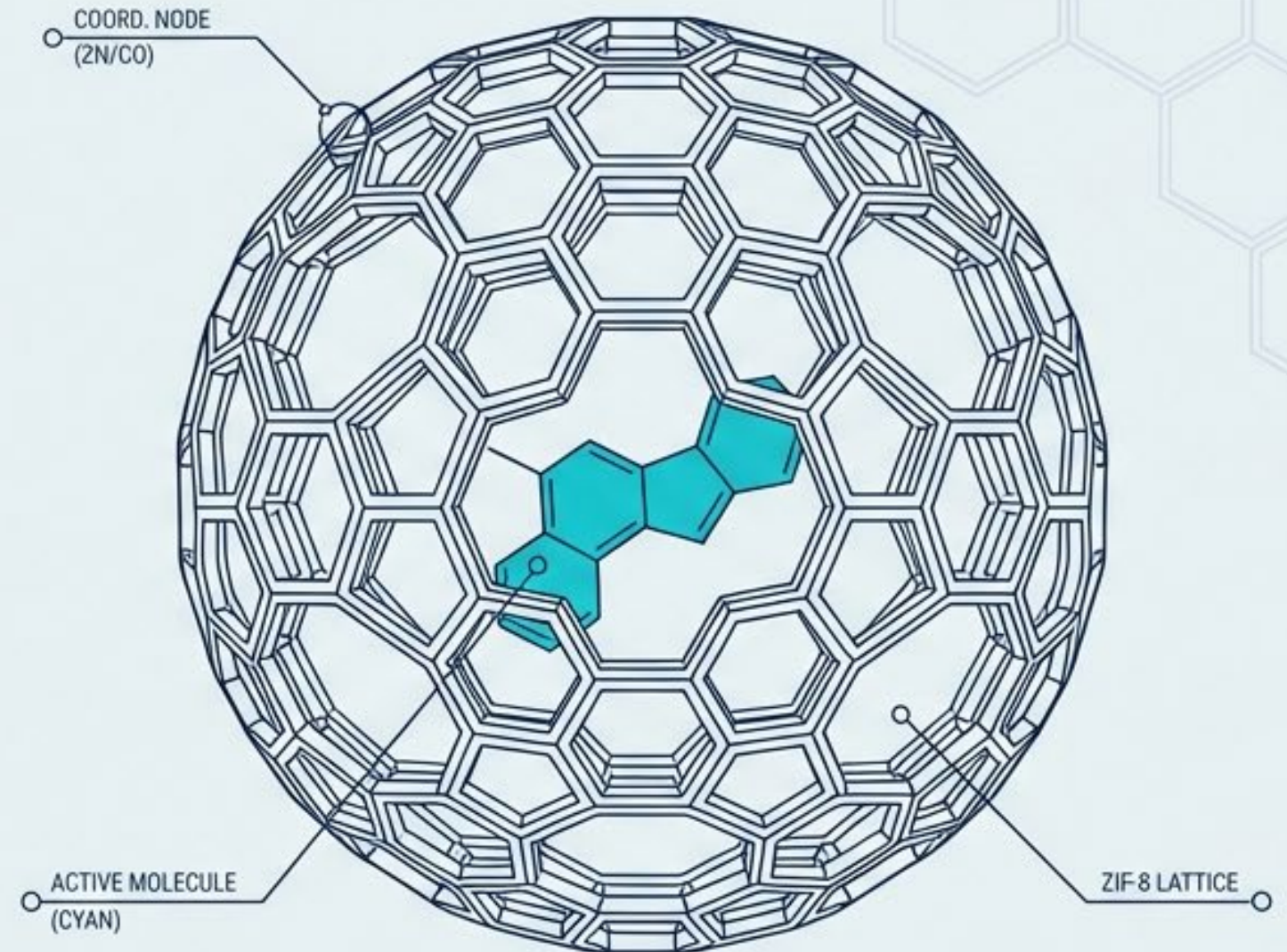


PROYECTO DE FIN DE GRADO (TFG)

Nanomedicina de Precisión

Ingeniería de MOFs para la Liberación Controlada de Quimioterápicos.

Tutora: Ana Martín Calvo (amarcal@upo.es)



El reto: ¿Podemos diseñar *in silico* un vehículo nanométrico que transporte un fármaco de forma segura y lo libere solo donde el cáncer lo necesita?

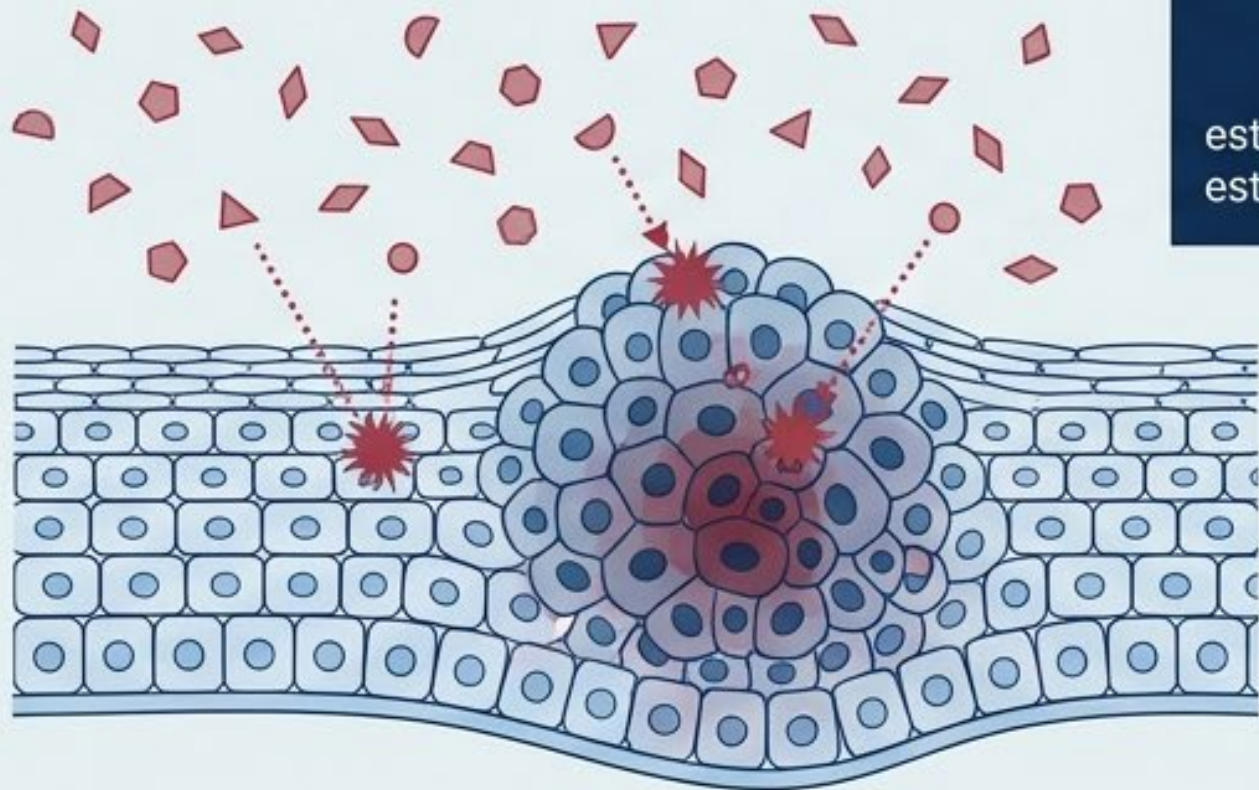
El Contexto: De la Toxicidad a la Precisión

El Problema: 5-Fluorouracilo (5-FU) libre

Tratamiento fundamental para el cáncer colorrectal,
pero limitado por:

Alta toxicidad sistémica.

Corta vida media en el organismo.



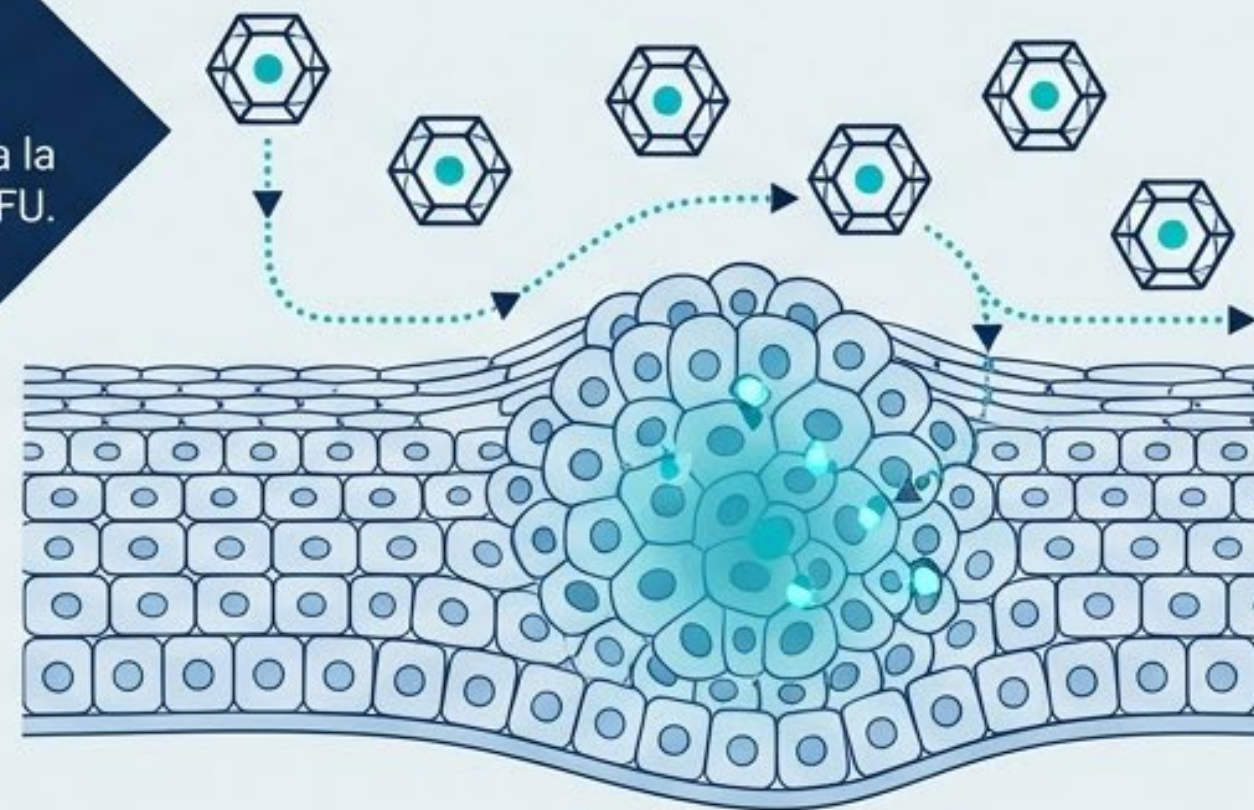
La misión de este TFG:
Evaluar *in silico* cómo la
estructura del ZIF determina la
estabilidad y difusión del 5-FU.

El Objetivo: Nanotransportadores ZIF

Materiales porosos (Zeolitic Imidazolate Frameworks)
que funcionan como vehículos inteligentes.

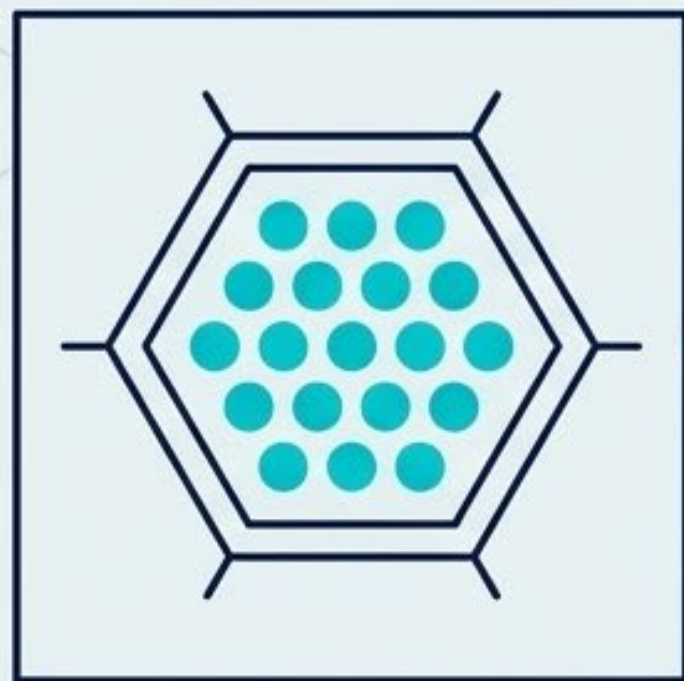
100% Biocompatibles.

Poros programables para dirigir la liberación.



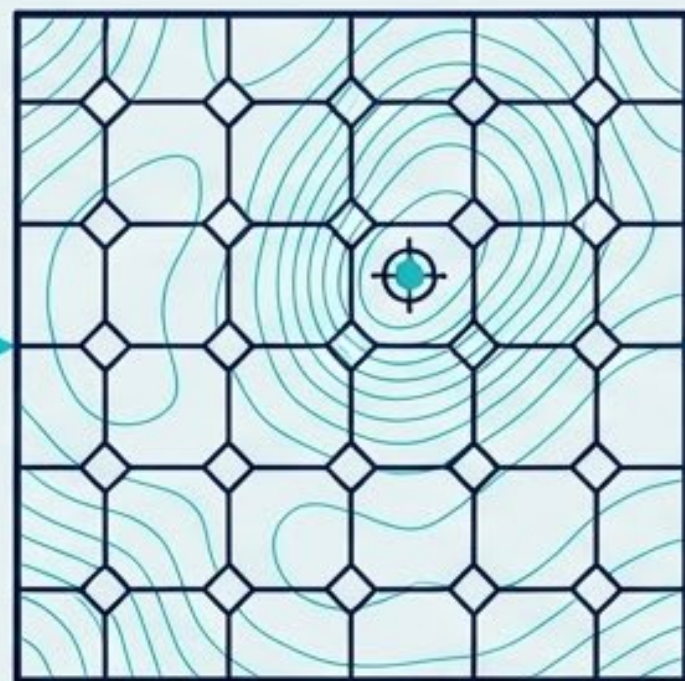
Metodología: Simulación Molecular

4 fases de simulación molecular de alto nivel para diseñar el nanovial:



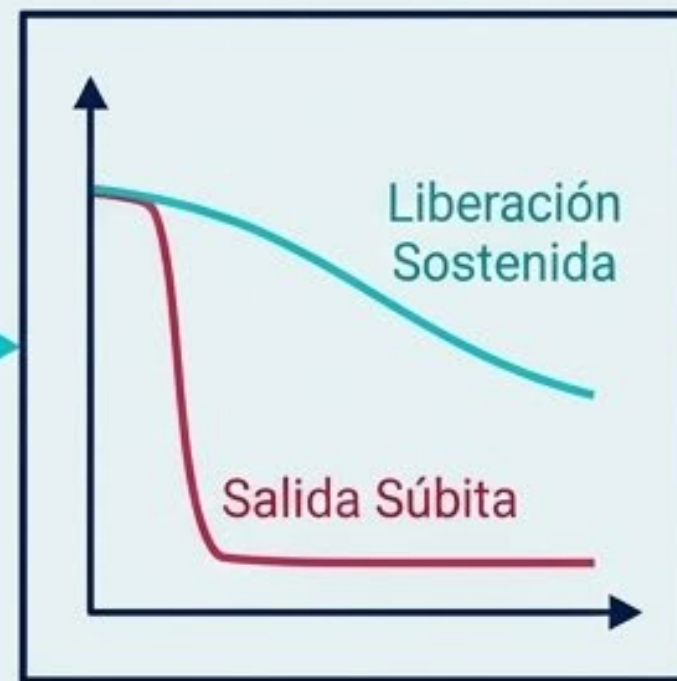
1. Monte Carlo

Determinar la capacidad máxima de carga del 5-FU optimizando la dosis teórica.



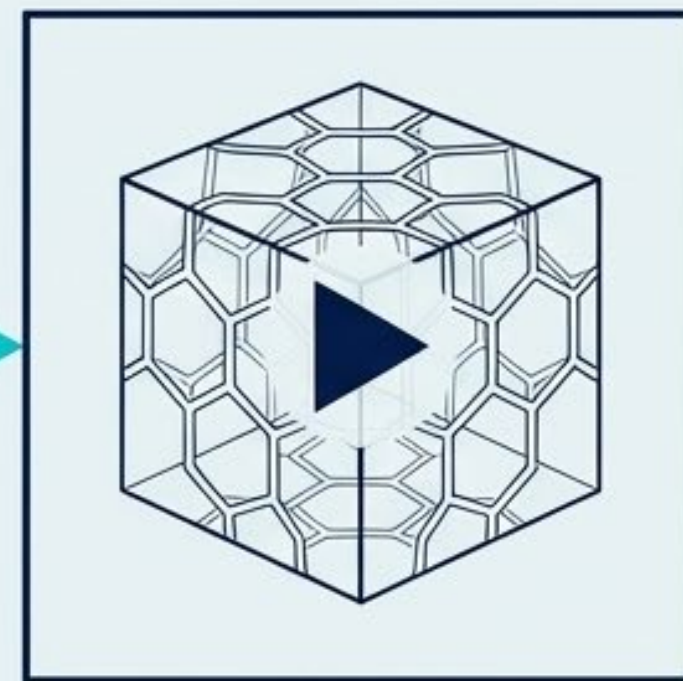
2. Mapas de Densidad

Identificar sitios de anclaje y calores de adsorción para comprender las fuerzas de retención molecular.



3. Dinámica Molecular

Calcular el coeficiente de difusión para predecir el comportamiento de liberación.



4. Modelado 3D

Crear trayectorias en vídeo del fármaco atravesando los poros. Herramientas clave para la defensa de tu TFG.

Impacto Esperado: Aplicación y Conocimiento



Impacto científico

Diseño in silico de un sistema de liberación de fármacos con potencial oncológico real. Contribuirás a la base tecnológica de la nanomedicina del futuro.



Impacto académico

Adquisición de competencias críticas altamente demandadas por la industria farmacéutica:

Bioinformática
Estructural

Nanotecnología
y Simulación

Proyección Científica: Por su relevancia clínica en el tratamiento del cáncer, los resultados de este proyecto tienen Un alto potencial de ser publicados en revistas científicas de impacto

Más Información: Ana Martín (amarcal@upo.es)