

Título: CONSTRUCCION QPSR DE REDES COMPLEJAS DE SISTEMAS MOLECULARES AUTOENSAMBLADOS A ESCALA NANOSCÓPICA

Nombre: Besada Porto, Marcelina

Universidad: Universidad de Santiago de Compostela

Departamento: Física aplicada

Fecha de lectura: 25/04/2014

Programa de doctorado: CIENCIA Y TECNOLOGÍA DE MATERIALES

Dirección:

- > **Director:** Juan Manuel Ruso Beiras
- > **Codirector:** Humberto González Díaz

Tribunal:

- > **presidente:** Pablo García Tahoces
- > **secretario:** Manuel Vázquez Ramallo
- > **vocal:** Marta Teijeira Bautista
- > **vocal:** Riccardo Concu
- > **vocal:** NIEVES PEDREIRA SOUTO

Descriptor:

- > FISICA DE COLOIDES
- > ESTRUCTURA MOLECULAR
- > QUIMICA DE COLOIDES
- > FARMACOLOGIA MOLECULAR

El fichero de tesis ya ha sido incorporado al sistema

Localización: BIBLIOTECA XERAL DA USC

Resumen: En este trabajo hemos caracterizado el proceso de agregación de una serie de principios activos mediante modelos experimentales e informáticos. Para ello, en primer lugar, estudiamos la formación de los agregados por diferentes técnicas experimentales. Hemos usado diferentes modelos termodinámicos para describir la espontaneidad y estabilidad de dichos agregados. En una segunda fase y basándonos en una base de más de mil fármacos distintos hemos desarrollado un modelo QSPR que incorpora nuevos descriptores moleculares con una importante capacidad de captura de información estructura relevante. Dicho modelo fue primero cotejado con los resultados experimentales y posteriormente nos permitió predecir el proceso de auto-agregación en nuestros sistemas en condiciones no estudiadas experimentalmente. En definitiva, en el trabajo presente, modelos informáticos y resultados experimentales se entretajan y complementan para aprender de los aciertos y errores de ambos.

