

**ANEXO I
PROPOSTA DE PROXECTOS DE INVESTIGACIÓN STEMBACH**

Coordinación STEMBach na Facultade/Escola UVigo:	
Nome: Marta Teixeira Bautista	
Enderezo electrónico: qomaca@uvigo.gal	Teléfono: 986 812 280
Dirección do proxecto UVigo:	
Nome: Olalla Nieto Faza	
Enderezo electrónico: faza@uvigo.es	Teléfono: 617239986
Co-dirección do proxecto UVigo:	
Nome: Sofia Kiriakidi	
Enderezo electrónico: skyriakidi@uvigo.es	Teléfono: 986812632
Bienio	2023-2025
Número de participantes (máx. 4)	1-4

NOTA: Os custos derivados da execución deste proxecto de investigación tales como os desprazamentos do profesorado da UVigo ao centro educativo ou doutras actividades establecidas no plan de traballo, correrán a cargo do centro educativo ao que se asigne este proxecto.

Título

Buscando inhibidores de oncoproteínas

Resumo

Mutacións en proteínas da familia Ras están presentes en gran parte dos cancros. Posto que a expresión continua destas mutacións é precisa para o mantemento do tumor, son un obxectivo da industria farmacéutica no tratamento desta enfermidade, pero ata o momento non se atoparon inhibidores farmacolóxicos efectivos para elas. Neste proxecto utilizaremos técnicas de docking para buscar moléculas que se unan a estas proteínas e dinámica molecular para analizar o efecto na súa función das candidatas máis prometedoras.

Obxectivo

Utilizaranse bases de datos de medicamentos aprobados (por tanto, cun perfil de seguridade e biodisponibilidade óptimos) pola FDA para avaliar a súa capacidade de unirse á proteína K-Ras a través de técnicas de docking molecular. Unha vez seleccionados os candidatos máis prometedores, empregaremos simulacións de dinámica molecular para avaliar o seu efecto nas funcións destas proteínas, co obxectivo de inhibilas.

Os estudantes adquirirán unha formación multidisciplinar en bioquímica molecular, química médica, estrutura de proteínas, interaccións intermoleculares e técnicas computacionais utilizadas na investigación actual.

Plan de traballo

0. Análise da bibliografía e presentación das liñas de traballo: o cancro, o proceso de desenvolvemento de fármacos, estrutura e función de proteínas, fundamentos de modelización molecular
1. Construción dun modelo tridimensional de proteína K-Ras a partir da información do Protein Data Bank
2. Selección de moléculas pequenas aprobadas para o seu uso como fármacos
3. Docking das moléculas sobre a proteína
4. Análise dos resultados e selección de candidatos
5. Dinámica molecular do complexo medicamento-proteína
6. Análise dos resultados, elaboración e presentación dun informe científico