

---

**CARACTERIZACIÓN ESTRUCTURAL DE MATRICES PEPTÍDICAS CON  
APLICACIONES EN REGENERACIÓN DE TEJIDO BIOLÓGICO**

**PATRICIO IGNACIO BRIONES REBOLLEDO  
INGENIERO CIVIL EN BIOINFORMÁTICA**

**RESUMEN**

Los biomateriales son compuestos sintéticos diseñados para interactuar con sistemas biológicos y que, junto a la ingeniería de tejidos, han generado una gran revolución en el campo biomédico. Enfocados en la medicina regenerativa, se ha demostrado que algunos péptidos similares al colágeno (CLP) al estar funcionalizando y protegiendo nanopartículas metálicas, han logrado regenerar tejido biológico de piel, cornea e incluso tejidos tan complejos como el de corazón. Más en detalle, se ha propuesto que los CLP permitirían la comunicación del nanomaterial a la matriz extracelular (EMC), la cual está formada de redes macro-biomoleculares tridimensionales y proteínas de comunicación extracelular tales como las Integrinas. Por otro lado, los CLPs han sido destacados por su unión selectiva a integrinas por medio de motivos conocidos (GFOGER, RGD). Sumado a esta gran red de elementos que conforman la matriz extracelular, el polietilenglicol (PEG) es un poliéter muy utilizado en la funcionalización de nanomateriales y posee características químicas que lo hacen candidato directo para la creación de hidrogeles basados en nanopartículas poliméricas. Por ende, el uso de PEG podría otorgar cualidades de señalización celular específica a nanopartículas, como lo son las terapias contra el cáncer. Sin embargo, poco se conoce respecto a la organización estructural de esta matriz sintética extracelular, como tampoco el efecto estabilizador que a nivel macroscópico otorga la utilización de PEG en conjunto con CLP. En este ámbito, se ha postulado que el uso de matrices sintéticas y bio-funcionales sería clave para la estabilización de la ECM. Adicionalmente, el conocer detalles estructurales del autoensamblado de estas matrices extracelulares permitiría comprender los mecanismos de ordenamiento, así como también las interacciones moleculares involucradas en la estabilización, que le confieren propiedades macromoleculares de interés para el diseño y optimización de este tipo de materiales. En base a lo expuesto, en este

---

proyecto se propone realizar un estudio del orden tridimensional adquirido luego del proceso de autoensamblado de una matriz peptídica, y con ello orientar al futuro desarrollo de biomateriales sintéticos con aplicaciones en regeneración de tejido biológico. Para ello, se utilizará un set de herramientas computacionales tales como simulación molecular con y sin presencia de solvente, así como también análisis masivos mediante VMD para poder estudiarlos en tiempos a nanoescala.

## ABSTRACT

Biomaterials are synthetic compounds designed to interact with biological systems, which, together with tissue engineering, have generated a great revolution in the biomedical field. Focusing on regenerative medicine, several studies have shown that collagen-like peptides (CLP), by functionalizing and protecting metallic nanoparticles, have managed to regenerate biological tissue of the skin, cornea, and even tissues as complex as the heart. In detail, it has been proposed that CLPs would allow the communication of the nanomaterial to the extracellular matrix (ECM), which is made up of three-dimensional macro-biomolecular networks and extracellular communication proteins such as integrins. On the other hand, CLPs have been highlighted for their selective binding to integrins through known motifs like GFOGER and RGD. In addition to this large network of elements that make up the extracellular matrix, polyethylene glycol (PEG) is a polyether widely used in the functionalization of nanomaterials. Furthermore, its chemical characteristics make it a direct candidate for creating hydrogels based on polymeric nanoparticles. Therefore, PEG could provide specific cell signaling qualities to nanoparticles, such as cancer therapies. However, there is poor knowledge about the structural organization of this synthetic extracellular matrix nor the stabilizing effect that the use of PEG in conjunction with CLP provides at a macroscopic level. In this field, it has been postulated synthetic and bio-functional matrices would be the key to stabilizing the ECM. Additionally, knowing the structural details of the self-assembly of this extracellular matrix would allow us to understand the ordering mechanisms, and the molecular interactions involved in stabilization, which confer macromolecular properties of interest for the design and optimization of this type of materials. Based on the above, this project proposes to study the three-dimensional order acquired after the self-assembly process of peptide matrix and thereby guide the future development of synthetic biomaterials with applications in biological tissue regeneration. For this, a set of computational tools will be used, such as molecular simulation, with and without the presence of a

---

solvent, along with massive analysis through VMD to study them in nanoscale times.