

## Nytt program ger oss en användbar bild av cancerbekämpande nanopartiklar

Cancer hör till en av dagens främsta orsaker till dödlighet. Ett alternativ till de externa strålbehandlingsmetoderna är att bekämpa cancertumörer internt med polymertäckta nanopartiklar. Ett nyutvecklat program kan ge en bild av hur polymertäckta nanopartiklarna ser ut och deras storlek. Beräkningstiden på en PC är några få minuter för ett system med xx antal atomer, vilket är mycket bra. Eftersom programmet snabbt ger svar på hur olika polymerlängder och -tätheter påverkar partikeln kan det fungera som ett stöd vid utveckling av nanomedicinska produkter.

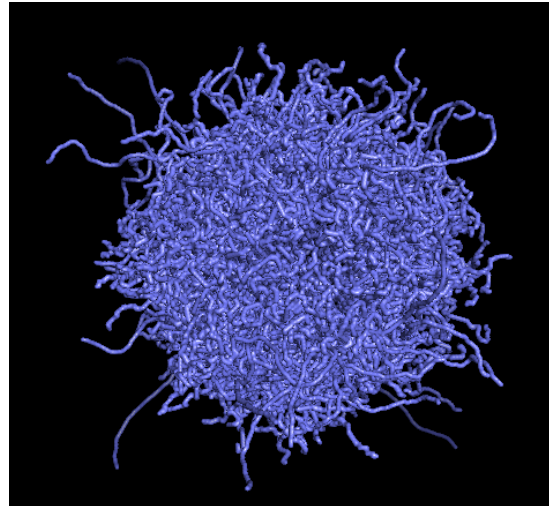


Illustration av en polymertäckt nanopartikel som beräknades inom fem minuter av ett nyutvecklat program. Nanopartikelns yta är helt täckt och förväntas ha ett bra skydd under transporten till cancertumören.

Nanopartiklar har under senare år visat sig vara lovande kandidater till många tekniska områden. Termen *nano* refererar till en miljarddel. Den finns fördelar med att arbeta med just denna skalan på sina partiklar vilket läkemedelsföretaget Spago Nanomedical AB utnyttjat i sina projekt SpagoPix och Tumorad för att detektera och behandla cancer.

Nanopartikelns transport till cancertumören genom blodomloppet är inte en helt oproblematisk process. Det har visat sig att kroppens proteiner kan ändra deras egenskaper och att de äts upp av immunförsvaret så de snabbt försvinner ur blodet innan de når tumören. Ett vanligt sätt att lösa detta är att täcka sina nanopartiklar med polymerer. En polymer är en molekyl som består av repeterande enheter. Enheterna kan antingen bygga på varandra som en kedja eller förgrena sig som ett träd. Polymerer fästa nära varandra på en yta kommer att formas likt en tätbevuxen skog, där vissa träd sträcker sig raka och höga och andra viker sig. För polymerer handlar det om de repulsiva krafter de känner från sig själva och sina grannar som får kejan att vridas, vikas och böjas. Polymerkedjor är begränsade av en så kallad *self-avoiding walk*. En *self-avoiding walk* kan beskrivas som att rita med en penna där du som ritar måste följa ett visst mönster men en tidigare punkt kan inte besökas igen och en tidigare linje får inte korsas. På så sätt kan två atomer inte existera på samma plats samtidigt vilket avgör polymerkedjans storlek och form.

I ett tredimensionellt rum, finns det nästan ett oändligt antal sätt som polymererna kan vrida, böja och vika sig på. Hur de gör detta berättar mycket om hur bra de kommer skydda nanopartikelns när den transporteras i kroppen. En tumregel är att nanopartikelns inte får vara "skallig" dvs. att polymertäcket ska vara så tjockt att nanopartikelns yta inte framträder. Det existerar inte några tydliga riktlinjer om vilken som är den optimala mängden polymerer att fästa på sina produkter eller vilken tjocklek man kan förvänta sig av ett visst polymertäcke. För att snabbt se hur en polymertäckt nanopartikel ser ut och vilken polymertäckets teoretiska tjocklek är har ett program utvecklats som bygger en fiktiv nanopartikel med valfritt antal polymerer på. Detta gör att flera olika varianter kan testas inom bara några minuter.

Möjligheten, genom tester av programmet, att bidra med användbara riktlinjer för hur ett polymertäcke ska väljas för olika applikationer är god. I ett större perspektiv kan det hjälpa forskare förstå hur de ska välja rätt polymertäcke på sina produkter, som ett steg i att bekämpa cancer och minska dödligheten i samhället.