



XXII CONGRESO ARGENTINO DE FÍSICOQUÍMICA Y QUÍMICA INORGÁNICA LA PLATA 2021

POROS TRANSMEMBRANA: ENERGÍA LIBRE DE FORMACIÓN, CLASIFICACIÓN

Moyano Nora¹, Klug Joaquín², Triguero Carles, Galassi Vanesa³, Millán Daniel¹ y Del Pópolo Mario³.

¹ CONICET & Facd. de Cs. Aplicadas a la Industria, UNCuyo, San Rafael 5600, Arg.

² Dublin City University, Chemical Sciences, Glasnevin, D9, Dublin, Ireland.

³ CONICET & Facd. de Cs. Exactas y Naturales, UNCuyo, Mendoza 5500, Argentina.

moyanonora@gmail.com

Introducción. La formación de poros está asociada a una mayor permeabilidad de la membrana y conductividad eléctrica, así como también, al transporte de fármacos y al intercambio de solutos solubles en agua, entre el exterior y el interior de las células. El estudio de los poros transmembrana, especialmente, estimar su energía libre de formación, resulta relevante para comprender los mecanismos por los cuales se producen tales eventos. Asimismo, para la estimación adecuada de la energía libre es necesario el uso de variables colectivas (VCs) apropiadas. Las VCs son funciones que dependen de la posición que toman las partículas del sistema de estudio y en Dinámica Molecular (DM) permiten aplicar técnicas de mejoramiento de muestreo. Además, las VCs pueden utilizarse como criterio de clasificación de las configuraciones. Los tipos de configuraciones a tener en cuenta son: membrana intacta, poro hidrofóbico, poro hidrofílico y poro de vapor. Nuestro objetivo fue definir VCs adecuadas, por un lado, para estimar la energía libre de la formación de los distintos tipos de poros, y por otro, para clasificar las configuraciones.

Resultados. En este trabajo definimos cinco nuevas VCs (ϕ , ψ , D_T , C_{OW} y C_{HG}). Corrimos una metadinámica 2D (Met2D) entre ϕ y ξ (VC definida por Tolpekina *et al.*¹), de una bicapa hidratada de POPC semiatomístico. Esto nos permitió conseguir, por primera vez, los cuatro tipos de configuraciones en una misma simulación. Luego, estimamos la superficie de energía libre (FES) de formación de poros transmembrana, a través del repesado de la Met2D con ψ y ξ . Adicionalmente, utilizamos, D_T , C_{OW} y C_{HG} para clasificar las configuraciones muestreadas. La FES obtenida sugiere la existencia de una barrera energética entre configuraciones de poro de vapor y de poro hidrofílico.

Conclusiones. La definición de un nuevo conjunto de VCs nos permitió estudiar la energética de formación de poros de membrana, con distintos grados de hidratación, mediante una única simulación de Dinámica Molecular.

Referencias

T. Tolpekina, W. K. den Otter and W. J. Briels, J. Chem. Phys., **2004**, 121, 12060–12066.