



# XXV *Jornadas de* **INVESTIGACIÓN**

**Resúmenes de  
investigaciones**  
*Proyectos 2016-2018*



**UNCUYO**  
UNIVERSIDAD  
NACIONAL DE CUYO

**SIIP**

SECRETARÍA DE INVESTIGACIÓN,  
INTERNACIONALES Y POSGRADO



**Título del proyecto**

**Mapeo de la superficie de energía libre de poros transmembrana**

Facultad de Ciencias Exactas y Naturales (UNCUYO) - [Proyecto 2016-2018]

**Director:** MOYANO, Luis Gregorio / **Codirector:** MILLÁN, Raúl Daniel

**Integrantes:** GÓMEZ PORTILLO FUNES, Juan Manuel; ELIZABETH MOYANO, Nora Alejandra

[moyanonora@gmail.com](mailto:moyanonora@gmail.com)

**Resumen:**

Cuando las membranas lipídicas se someten a estrés mecánico o eléctrico, se forman poros y canales de agua que conducen a cambios en la permeabilidad del agua y la conductividad iónica. Además, el costo energético de crear defectos transmembrana es un factor determinante en los procesos fisiológicos a nivel celular y afecta, entre otras cosas, al transporte de fármacos y metabolitos a través de la bicapa lipídica. En el presente trabajo, recurrimos a simulaciones de metadinámicas 2D para producir un mapa de energía libre que permite identificar la energía de formación y el mecanismo de nucleación de los poros transmembrana con diferentes tamaños y niveles de hidratación. Hacemos uso de dos variables colectivas complementarias: una controla la densidad de los lípidos alrededor de un punto específico en el plano de la membrana y, por lo tanto, permite crear un poro, y la otra controla la cantidad de moléculas de agua dentro del poro. Presentamos resultados preliminares para una bicapa de POPC atomística que incluye, por ejemplo, la formación de hilos de agua que percolan a través de la bicapa.