

## **Modelado Coarse-Grained de la Interacción entre una Nanopartícula de Oro esférica con ligandos y una Membrana Celular en un medio acuoso.**

### **Content**

Los estudios del transporte de nanopartículas (NPs) a través de membranas celulares son temas de gran relevancia para aplicaciones tecnológicas y biomédicas. Uno de las formas de transporte, es la permeación directa, que a diferencia de la endocitosis, representa una vía más eficaz para la entrega intracelular al no depender de la liberación vesicular y no inducir deformaciones en la membrana. Sin embargo, existen mecanismos fisicoquímicos que regulan este tipo de procesos y que permanecen poco comprendidos. El objetivo de este trabajo es realizar un estudio computacional de la interacción entre una nanopartícula de oro (AuNP) funcionalizada con ligandos con un modelo de membrana celular compuesta por 2 tipos de fosfolípidos y colesterol en un medio acuoso. Se realizaran simulaciones de dinámica molecular con GROMACS usando modelo de grano grueso (Coarse Grain) con el campo de fuerza Martini V3.0.0. Hasta el momento se ha construido una bicapa lipídica compuesta por 2 tipos de fosfolípidos POPC y DPPE (En Charmm-Gui), y se ha modelado (por separado (En NANOMODELER) una AuNP como esfera hueca de 2 nm de radio con ligandos PAE, y se está trabajando en la estabilización del sistema de la nanopartícula para evitar que colapse antes y después de que se integren como un solo sistema (NP-membrana) y realizar el análisis con DM de este último. Los resultados esperados incluyen la determinación de perfiles de energía libre asociados a la inserción de la AuNP y la identificación de los factores estructurales de la membrana que favorecen o limitan la permeación directa. Asimismo, se analizará la influencia de la temperatura sobre la permeación, dado su impacto en la hidrofobicidad superficial de las AuNPs. Este estudio busca contribuir a la comprensión fundamental de los mecanismos de transporte de nanopartículas y a su eventual aplicación en biomedicina y nanofarmacología.

### **Tipo de presentación**

Póster

**Primary author(s) :** Dr. ARMAS VÁZQUEZ, Marion Zulema (ICF, UNAM)

**Presenter(s) :** Dr. ARMAS VÁZQUEZ, Marion Zulema (ICF, UNAM)