



RESUMEN

La dinámica molecular de biomembranas es un campo fértil de investigación que promete develar numerosos interrogantes. A lo largo de esta tesis doctoral se incursionó en eventos biológicos tales como la curvatura de membranas y la formación de poros de fusión a nivel molecular. Para ello se realizaron simulaciones numéricas con el modelo de grano grueso de Martini capaz de representar sistemas moleculares a un costo computacional adecuado a los recursos actuales. En primer lugar se estudió la interacción de la α -sinucleína en el proceso de curvatura de una membrana demostrando la importancia de la región desordenada de la proteína para percibir e inducir la curvatura. Se continuó en esta misma línea midiendo las interacciones de una bicapa lipídica con las tetraspaninas CD81 donde se pudo observar un trabajo colectivo de estas proteínas y el mecanismo molecular para captar colesterol. Posteriormente, se logró crear una variable colectiva para inducir la formación de un poro de fusión partiendo de dos bicapas planas y paralelas. Se midió la energía libre y el papel de la sinaptotagmina en la estabilidad, en términos de tiempo de vida, del poro de fusión. Por último, se analizó el comportamiento de copolímeros de SMA con un poro de fusión formado y expandido. Se pudo determinar que es posible mantener el poro de fusión abierto artificialmente mediante la inserción de copolímeros de SMA en la capa interna de las bicapas lipídicas.

Doctorando: Lic. Marcelo R. Caparotta