

# Estudio computacional de determinantes biofísicos para la modulación del transporte en membranas biológicas modelo

Vanesa V. Galassi<sup>1</sup>, Mario del Pópolo<sup>1</sup>

Natalia Wilke<sup>2</sup>, Belén Oviedo<sup>3</sup>, Cristián Sánchez<sup>3</sup>

<sup>1</sup> CONICET. Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, UNCuyo, Mendoza 5500, Argentina.

<sup>2</sup> CIQUIBIC – CONICET. Departamento de Química Biológica, Facultad de Ciencias Químicas, UNC, Córdoba 5000, Argentina.

<sup>3</sup> INFIQC – CONICET. Departamento de Química Teórica y Computacional, Facultad de Ciencias Químicas, UNC, Córdoba 5000, Argentina.

El desarrollo de técnicas biofísicas que permiten explorar los determinantes moleculares de los finos mecanismos de regulación por los que las membranas biológicas modulan el transporte selectivo de solutos es fundamental para dar luz en el ámbito de la fisiología celular. El trabajo que se mostrará aborda dos temáticas. En primer lugar, se expondrá cómo membranas modelo sólidas se valen de transiciones en las fases inclinadas para dar lugar a cambios topológicos y reológicos locales. Luego se expondrán estudios preliminares para abordar el mecanismo por el cual moléculas cromóforas sensan potenciales electrostáticos de membrana, como los transmitidos en impulsos nerviosos y cardíacos.

## Computational study of the biophysical determinants for the transport modulation in model biological membranes

The development of novel biophysical techniques that allow to explore the molecular determinants of the finely regulated mechanisms by which biological membranes modulate the selective transport of solutes is critical to shed light into cellular physiology. The work exposed will address two different subjects. In first place, it will be shown that solid membranes use phase transition among tilted phases to give rise to local topological changes. Then, some preliminary studies will be addressed that are meant assess the mechanism by which a chromophoric molecule sense membrane electrostatic potential, such as the one transmitted during nervous and cardiac impulse.

