



VII Encuentro Argentino de Materia Blanda

Control morfológico de nanocanales modificados con cepillos polímeros mediante partículas entrecruzadoras: un estudio teórico

Perez Sirkin, Yamila A.¹, Tagliazucchi, Mario¹, Szleifer, Igal².

¹ INQUIMAE-CONICET y DQIAQF, FCEN- UBA. Pabellon 2, Ciudad Universitaria, CABA, Argentina.

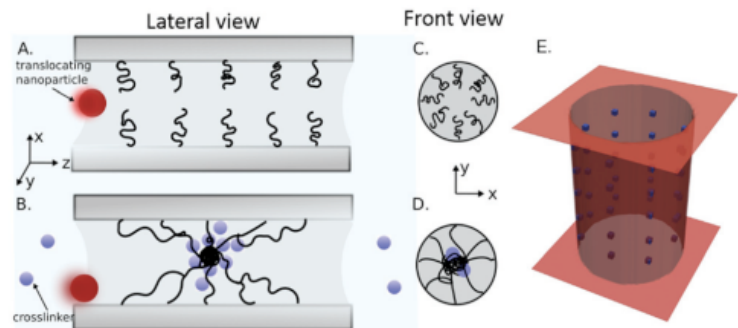
² Department of Biomedical Engineering, Northwestern University, Evanston, Illinois, USA.

yperezsirkin@gmail.com

Resumen del trabajo:

Los nanoporos modificados con cepillo poliméricos son estructuras sintéticas inspiradas en sistemas biológicos.¹⁻³ La presencia de los cepillos poliméricos permite regular el transporte de partículas a través del canal y otorga al sistema la capacidad de responder a estímulos externos. Este trabajo⁴ analiza teóricamente cómo la unión reversible de partículas solubles a una red polimérica se puede utilizar para controlar el transporte a través de nanocanales y poros. El estudio se realizó con una teoría molecular que permite inhomogeneidades en las tres dimensiones y tiene en cuenta explícitamente el tamaño, la forma y las conformaciones de todas las especies moleculares, considerando las interacciones intermoleculares entre los polímeros y las partículas solubles e incluye la presencia de una partícula que es translocada a través del poro.

Se pudo observar que al aumentar la concentración de las partículas solubles en los reservorios, aumenta gradualmente su número dentro del poro hasta que se alcanza una concentración de volumen crítica. En la concentración crítica, el número de las partículas dentro del poro aumenta abruptamente. Para cadenas largas, esta transición repentina desencadena el colapso del cepillo de polímero en el centro del nanoporo. La estructura resultante aumenta la barrera de



energía que la translocación de una partícula y en consecuencia modifica la ruta de translocación desde el eje del poro a sus paredes (ver figura). Por otro lado, para cadenas poliméricas cortas las partículas provocan el colapso del cepillo en las paredes de los poros, lo que reduce la barrera de translocación. Finalmente, se muestra que el número de partículas dentro del canal vs su concentración en el bulk presenta un *loop* de van der Waals durante el colapso de los polímeros, lo cual sugiere la presencia de metaestabilidad en el sistema. Nuestras predicciones pueden ser utilizadas para el diseño racional de nanoporos sintéticos donde se desee controlar reversiblemente el paso de partículas.

Bibliografía:

1. Fernandez-Martinez and M. P. Rout, *Curr. Opin. Cell Biol.* **2012**, 24, 92-99
2. O. Peleg and R. Y. Lim, *Biol. Chem.* **2010**, 391, 719-730.
3. S. J. Kim et. al. *Nature*, **2018**, 555, 475-482.
4. Y. A. Perez Sirkin, M. Tagliazucchi and Igal Szleifer, *Soft Matter*, **2021**, 17, 2791-2802.