

MÁSTER DE FÍSICA BIOMÉDICA. CURSO 2019/20

PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE MÁSTER

Título: Estudio de la permeabilidad osmótica para nanoestructuras en membranas lipídicas

Title: Osmotic permeability study for nanostructures in lipid membranes

Director 1

Nombre, e-mail **Miguel Ángel González González** miguelangel.gonzalez@ucm.es

Centro y Departamento **Facultad de Ciencias Químicas. Departamento de Química Física**

Director 2*

Nombre, e-mail **Chantal Valeriani** cvaleriani@ucm.es

Centro y Departamento **Facultad de Ciencias Físicas. Departamento de Estructura de la Materia. Física**

Resumen**

La transferencia de agua a través de la membrana celular es esencial para el correcto funcionamiento metabólico de la célula. Este transporte de agua se magnifica en órganos como el riñón, que se especializa en el filtrado de la sangre pudiendo purificar unos 180L de sangre al día. Esto es posible solo si se reabsorbe el 99% de agua tratada por el riñón. Para una mejor comprensión de este y otros procesos de transporte de agua a través de una membrana se desarrollan modelos sencillos que permiten una aproximación más eficiente en el laboratorio. Las vesículas lipídicas en combinación con nanotubos de carbono son un claro ejemplo de la modelización de un sistema biológico. Sin embargo, estos sistemas son complejos de tratar a escala nanométrica y de comprender el mecanismo molecular que subyace. Con la motivación de descubrir y describir esos mecanismos se utiliza la simulación molecular.

Para el presente TFM, se ofrece un estudio de simulación molecular llevada a cabo por dinámica molecular, la cual es una herramienta muy útil para la descripción de mecanismos moleculares ya que se controla a escala nanométrica el comportamiento de las moléculas y átomos que son las piezas fundamentales en el proceso de estudio. En nuestro caso, se creará un sistema con dos regiones acuosas distinguiéndose por la diferencia de concentración de sales contenidas en ellas, por un lado crearemos una disolución 140mM de KCl y por el otro 145 mM NaCl imitando las condiciones celulares. Las dos disoluciones se conectan a través de un nanotubo embebido en una membrana lipídica. El estudio se basa en el cálculo de la permeabilidad osmótica del sistema, propiedad que nos ofrece la eficiencia del nanotubo como canal transmembránico para el filtrado de agua en la célula.

Observaciones***

Es muy recomendable que el alumno tenga conocimientos del entorno Linux, de programación y conceptos de Mecánica Estadística

* Solo en el caso de dos co-directores.

** Breve resumen de los objetivos.

*** Optativo. Por ejemplo si se recomienda tener algún conocimiento o experiencia previa.