

ADSORCIÓN E INSERCIÓN DE NANOPARTÍCULAS FUNCIONALIZADAS CON PÉPTIDOS DE PENETRACIÓN CELULAR EN MEMBRANAS LIPÍDICAS

Chiarpotti M.V.^{1,2}, Bizzotto N.², Del Pópolo M. G.^{1,2}, Longo G. S.³

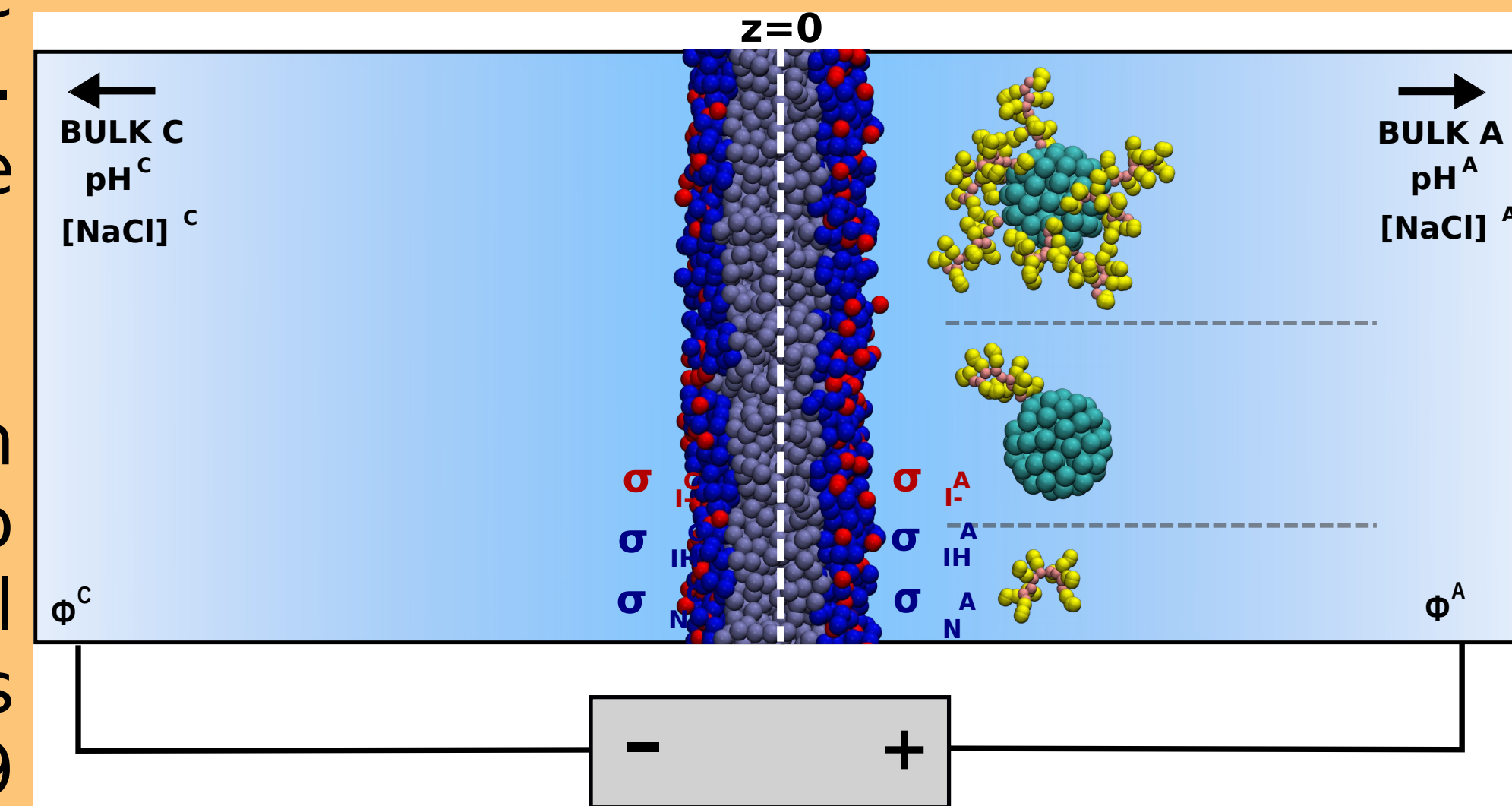
1. Instituto Interdisciplinario de Ciencias Básicas (ICB), CONICET UNCUIYO, Mendoza, Argentina.

2. Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad Nacional de Cuyo, Mendoza, Argentina.

3. Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA), UNLP-CONICET, La Plata, Argentina.

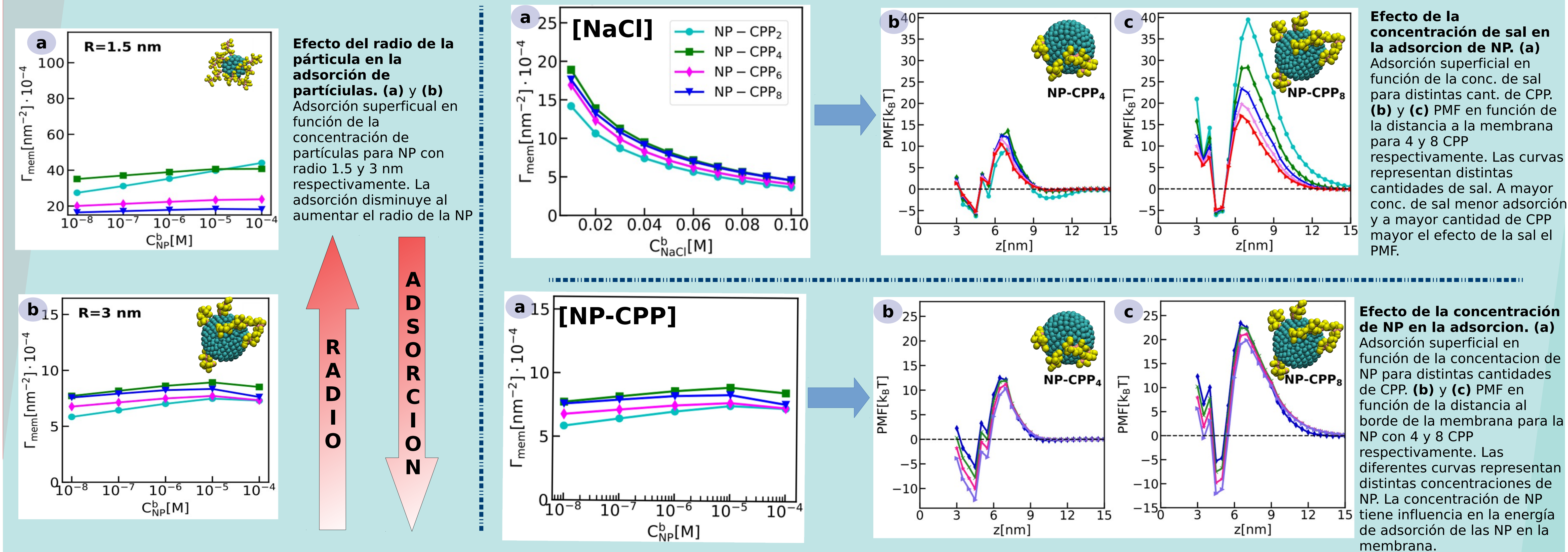
Motivación y Teoría Molecular

- Los Péptidos de Penetración Celular (CPP) facilitan la absorción celular de cargos de tamaño nanométrico. Su acumulación en la membrana regula la tasa de internalización.
- Caracterizamos la adsorción de nanopartículas (NP) recubiertas con CPP sobre membranas lipídicas bajo diferentes condiciones.
- estudiamos la adsorción de NP en membranas con poros.
- Nuestros resultados se obtienen aplicando una teoría molecular (TM) que tiene en cuenta las interacciones electrostáticas y estéricas, los efectos entrópicos y el equilibrio ácido-base de todas las moléculas titulables. También tiene en cuenta la forma, el estado de protonación, la distribución de carga y la flexibilidad conformacional de las partículas funcionalizadas con péptidos. En el presente trabajo utilizamos arginina 9 como CPP.

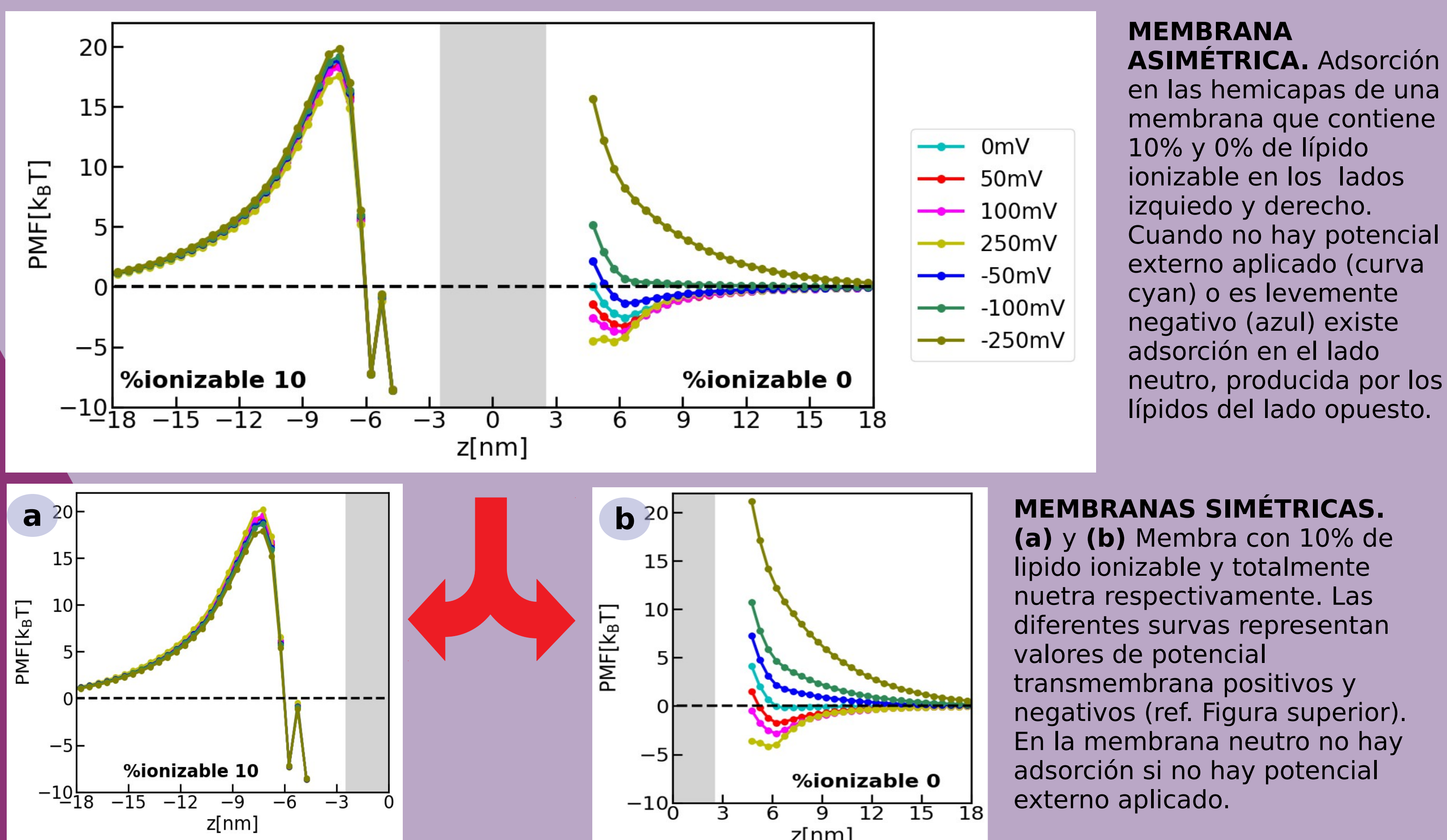


• Más info: *Colloids and Surfaces B: Biointerfaces* 197 (2021) 111373

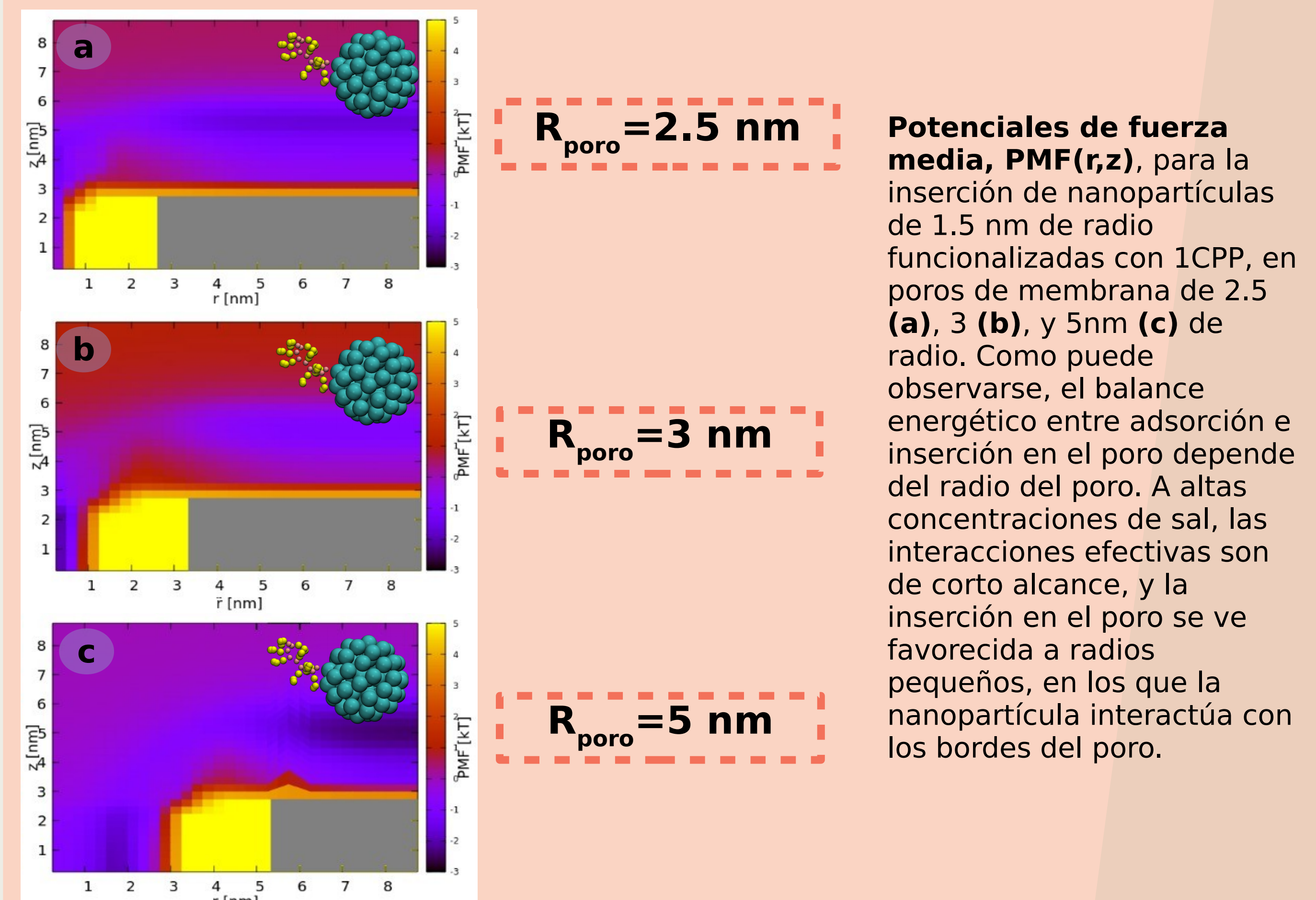
Efecto del radio, concentración de sal y concentración de partículas



Efecto del potencial TM y la asimetría de la membrana



Penetración en membranas lipídicas con diferente tamaño de poro



Conclusiones

- Partículas con radios mas pequeños presentan mayores niveles de adsorción en la membrana independientemente de la cantidad de CPP sobre la NP, esto se debe a efectos entrópicos cerca de la membrana.
- La concentración de partículas en el sistema, así como la cantidad de CPP, no afectan de forma significativa los niveles de adsorción, pero sí la energía de adsorción de las NP.
- La concentración de sal es de los parámetros estudiados, el más influyente en los niveles de adsorción. A concentraciones de sal alta se produce un apantallamiento entre la NP y la membrana dificultando la adsorción, además tiene un efecto importante sobre la barrera de activación de las NP, este efecto se incrementa con la cantidad de CPP.
- Las membranas asimétricas muestran un efecto de potencial TM entre una hemicapa cargada y una neutra, induciendo adsorción de NP del lado neutro incluso a potenciales TM levemente negativos.
- Estudios preliminares de la inserción de nanopartículas en poros de membrana muestran que el balance energético entre adsorción e inserción depende del radio del poro y de la concentración de sal. Además, el mecanismo de inserción de las partículas en el interior del poro es térmicamente activado.