



## Interacciones Moleculares en Interfases Biológicas y Minerales: un estudio de Dinámica Molecular.

Edgar Galicia Andrés<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Department of Material Sciences and Process Engineering, Institute of Molecular Modeling and Simulation, University of Natural Resources and Life Sciences, Vienna, Austria

edgar.galicia@boku.ac.at

### Resumen

Las interacciones moleculares entre especies (bio)químicas son responsables de las propiedades y funciones en sistemas complejos como los seres vivos o incluso ecosistemas en su totalidad. Aún con los avances tecnológicos, la medición e interpretación de fenómenos a escala molecular sigue siendo un misterio por el tamaño inherente de los sistemas. En este contexto, las interfases moleculares destacan al ser regiones espaciales donde se llevan a cabo procesos de transferencia de masa y energía. Estas presentan un reto particular al tener tamaños en espesores que van desde 1 átomo hasta paredes celulares.

En sistemas biológicos, una de las interfases más relevantes son las membranas celulares. Estas se componen principalmente por moléculas lipídicas alineadas entre sí de manera paralela y antiparalela, formando dos capas cuya función es separar y proteger el interior de la célula del entorno extracelular. Es posible el acceso de una región a otra, así como la transmisión de señales bioquímicas a través de proteínas transmembranales (TPs) localizadas en la membrana. Una de las TPs que ha recibido atención es el receptor del factor de crecimiento epidérmico (EGFR) cuyas mutaciones se han observado frecuentemente en el carcinoma pulmonar no microcítico (NSCLC) y glioblastomas. Usando dinámica molecular (MD) elucidamos el mecanismo de dimerización de las mutaciones L648Q y G652R en el dominio transmembranal que conlleva a la activación en cascada y la señalización para la síntesis de ADN y proliferación celular.

En las ciencias del suelo, las interfases minerales tienen un papel fundamental en la adsorción de compuestos contaminantes y nutrientes, así como la retención de carbono orgánico. El carbono orgánico es uno de los componentes la materia orgánica del suelo (SOM), procedente de residuos microbianos, vegetales y animales en su etapa final de descomposición. Inspirados por la jerarquía estructural de las biomoléculas, en nuestro grupo se desarrolló el programa VSOMM, capaz de generar modelos moleculares únicos de SOM según el contenido y composición orgánica deseada, utilizando bloques de construcción similares a los aminoácidos. Estos modelos, en combinación con modelos de arcillas minerales y MD, nos han permitido describir la formación de complejos órgano-minerales (OMAs) y así como su doble capa eléctrica (EDL). Los resultados sugieren que la estructura intrínseca de la SOM expuesta ofrece una gran cantidad de sitios de adsorción para iones, moléculas polares e hidrofóbicas.