

Dinámica de dominios en monocapas.

S. Panzuela¹, L. Mederos² y E. Velasco¹

¹ Departamento de Física de la Materia Condensada, Universidad Autónoma de Madrid, Campus de Cantoblanco, Madrid 28949, España.

² Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid, CSIC, Campus de Cantoblanco, Madrid 28949, España.

Las gran diversidad de componentes y estructuras que conforman el surfactante pulmonar hacen que después de tres décadas aún queden preguntas sin resolver[1]. Recientes esfuerzo en el entendimiento del surfactante pulmonar se centran en la interacción lípido-proteína. Es sabido que las proteínas SP-B y SP-C juegan un papel crucial en el ciclo de la respiración, entre sus funciones, se les califica de mediadoras en la fusión de complejos lipídicos tales como vesículas-vesícula, vesícula-bicapa y activadoras del colapso de monocapas de surfactante pulmonar. Igualmente, las proteínas SP-B y SP-C facilitan la difusión de lípidos de DPPC (su principal tensoactivo) segregados en fases condensadas hacia fases diluidas permitiendo así una rápida re-expansión durante los ciclos compresivos-expansivos de la respiración.

En el actual trabajo presentamos un modelo simplificado de fosfolípido en dos dimensiones con la idea de capturar las principales contribuciones de la dinámica de dominios de las monocapas lipídicas compuesta por dos especies de fosfolípidos. Como referencia hemos tomado modelos Coarse-Grained de monocapas y bicapas lipídicas así como de resultados experimentales[2]. En el presente modelo, los fosfolípidos interactúan entre si a través de potenciales que depende de la orientación molecular (potencial de Gay-Berne y dipolar). Justificamos la acilindricidad de dichos fosfolípidos como resultado de la proyección de sus cadenas alifáticas (dos por lípido) en el plano de la monocapa además del momento dipolar proveniente del grupo fosfato.

Distintas simulaciones de dinámica molecular (NVT) para monocapas de un solo componente con interacciones GB y un número total de moléculas $N=1024$, 4096 y 16384 han sido realizadas con *Universal adaptable multiscale molecular dynamics* (UAMMD), un código desarrollado por nuestro grupo de investigación y totalmente implementado en GPU. En estudios preliminares realizados se ha caracterizado el diagrama de fases de sistemas monocomponentes GB para distintos relaciones de aspecto $\kappa=2, 3, 4$ y 5. La relación de aspecto $\kappa = 3$ ha sido elegida convenientemente en analogía a la anchura de la transición líquido-gel de las monocapas lipídicas dado por el modelo Coarse-Grained.

Finalmente trabajaremos en la región de separación de fases líquido-sólido dada una concentración de fase sólida, estudiando su dinámica de dominios, estabilización de dominios y morfología[3]. Por último estudiaremos los efectos de las interacciones dipolares en la dinámica de dominios.

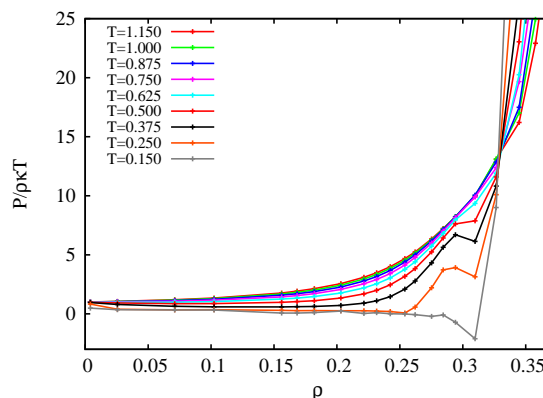


Figure 1: Diagrama $\frac{P}{\rho\kappa T}$ frente a ρ para isotermas a temperatura T [0.150-1.150] en monocapas lipídicas con relación de aspecto $\kappa = 3$. Temperatura y densidad $\rho = \frac{N}{L_x L_y}$, siendo L_x y L_y el tamaño de la caja de simulación a lo largo del eje x e y, dadas en unidades reducidas.

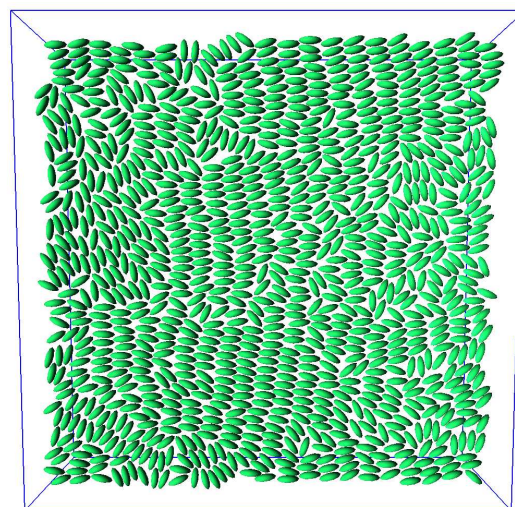


Figure 2: Simulación de dinámica molecular en dos dimensiones de 1024 moléculas GB con relación de aspecto $\kappa = 3$.

- [1] Jesús Perez-Gil and Timothy E. Weaver. Pulmonary Surfactant Pathophysiology: Current Models and Open Questions. *Physiology* 25, 132-141, 2010.
- [2] D. Van Der Spoel, E. Lindahl, B. Hess, G. Groenhof, A. E. Mark, and H. J. C. Berendsen, *J. Comput. Chem.* 26, 1701 (2005).
- [3] Harden M. McConnell, Lukas K. Tamm, and Robert M. Weis. Periodic structures in lipid monolayer phase transitions. *roc. Natl. Acad. Sci.* V. 81, 3249-3253 (1984).