

RESUMEN ANALÍTICO (RAE)

Tipo De Documento: Monografía

Acceso Al Documento: Universidad Pedagógica Nacional

Título De Documento: Análisis de la estabilidad de los Potenciales Brannigan-Phillips-Brown en la formación de la membrana del Liposoma

Autor(s): CORDOBA HERNÁNDEZ, Ibeth Cristina.

Asesor: Néstor Méndez Hincapié

Unidad Patrocinante: Universidad Pedagógica Nacional

Palabras Claves: Membrana, liposoma, potencial, fosfolípido.

Descripción: En el presente trabajo de grado se analiza la estabilidad de los potenciales propuestos en la literatura por Grace Brannigan, Peter F. Phillips y Frank L. H. Brown [7], para el caso de la formación de la membrana del liposoma. El estudio de este fenómeno se basó en el modelo Coarse-Grained, el cual simplifica el componente fundamental de la membrana del liposoma, es decir, el *fosfolípido*, asumiendo que los componentes químicos de éste se pueden considerar como partículas esféricas que interactúan bajo potenciales centrales.

Este análisis requiere no solamente el uso de métodos numéricos para la solución de las ecuaciones de movimiento de las partículas, sino también de herramientas computacionales que permitan visualizar los diferentes tipos de potenciales y las interacciones que producen en el sistema.

Fuentes:

Las principales fuentes utilizadas en este trabajo son:

Brannigan,G., Philips,P., Brown, F. *Flexible lipid bilayers in implicit solvent*, en <http://arxiv.org/abs/cond-mat/0502623>, 2007.

Davis, C., Nie, H., Dokholyan, N., *Insights into thermophilic archaeobacterial membrane stability from simplified models of lipid membranes*. en Physical Review, E.75, 051921, 2007.

Gould, H. *An Introduction to computer simulation methods*. Tercera edición. Estados Unidos: Pearson Education(2007).

Philippot, P., Schuber, F. *Liposomes as tools in basic research and industry*. Estados Unidos: CRC Press (1995).

Contenidos: El primer capítulo hace un acercamiento tanto a los aspectos generales de la membrana biológica como al vocabulario necesario para contextualizar al lector sobre las características relevantes del medio en donde tienen lugar los fenómenos de formación e interacción de la membrana, además se hace un breve resumen de la historia de los modelos de la membrana a través del tiempo hasta llegar al modelo de Coarse-Grained. En el segundo capítulo se realiza una reflexión de la importancia de los computadores y las simulaciones, no sólo en el ámbito científico sino también en el educativo, finalizando con el modelo a usar bajo los potenciales de Brannigan-Phillips-Brown [7]. En el tercer capítulo se lleva a cabo el desarrollo de los pasos de la simulación, el método usado y la implementación de éste en C++ con apoyo de PovRay en la plataforma Linux, en este apartado ya se pueden obtener algunos resultados, particularmente se vislumbra un problema de estabilidad. En el cuarto capítulo se presenta el análisis realizado para la estabilidad de los potenciales mencionados para pocas partículas. Se muestran las gráficas obtenidas para dichos potenciales mostrando la inestabilidad de éstos y la necesidad de proponer otros potenciales.

Metodología: En la elaboración de esta monografía se utilizaron artículos relacionados con el tema. La utilización del modelo Coarse Grained para la explicación de la formación de la membrana posee muchas variantes que tienen que ver con el tipo de membrana, los tiempos de computo, las magnitudes de las fuerzas dadas por los potenciales, entre otros, por lo cual existen muchas versiones de éste. En este trabajo se utilizó la versión hecha por Brannigan, Phillips y Brown [7]; asimismo se inició con la construcción de los videos que dieran cuenta de la estabilidad o inestabilidad de los potenciales propuestos para dar explicación a la formación de la membrana, con el fin de comprobar su efectividad para pocas partículas; simultáneamente se analizaron la forma total de los potenciales para tres y cinco partículas que evidencia la existencia o no de pozos de potencial y por tanto la estabilidad de la configuración del modelo.

Conclusiones:

- Al realizar las simulaciones, fue evidente la necesidad de introducir un nuevo potencial al que llamamos U_{own} que aunque poseía una potencia cuadrada no estaba reportado en la literatura y fue utilizado para crear estabilidad entre las cadenas de fosfolípidos, tal como se observa en los videos 5.avi, 9.avi, 10.avi y 11.avi
- A pesar de la introducción del potencial U_{own} las cadenas de fosfolípidos no fueron estables, tal como se observa en los videos 6.avi, 7. avi y 9.avi, hecho atribuido a la poca cantidad de esferas; la literatura reporta estabilidad con más de 800 esferas pero esto requiere herramientas computacionales más poderosas, bien sea por motores gráficos con mayor capacidad ó hardware más potente. El tamaño del paso utilizado también

puede hacerse más pequeño utilizando herramientas más sofisticadas que permitan realizar cálculos a mayor velocidad.

- En la única cadena en donde se observa estabilidad (ver videos 10.avi y 11.avi), esto sólo se encuentra adicionando el potencial U_{own} , de donde se deduce que un potencial de este tipo debe ser adicionado. Este caso en particular se muestra cómo los modelos van evolucionando y tienen que ser modificados a medida que se encuentran nuevas evidencias experimentales en donde el modelo no hace predicciones correctas del fenómeno, por ejemplo, la literatura reporta estabilidad utilizando cierta cantidad de partículas bajo el método de Monte Carlo, pero realizando la simulación a través de Dinámica Molecular y con pocas partículas no se llega a este resultado; de estos hechos, se puede evidenciar que la ciencia no es algo acabado que se encuentre en los libros como se acostumbra a enseñar.
- Es evidente la necesidad de realizar análisis desde el punto de vista físico en diferentes campos, ya que abren grandes posibilidades para el desarrollo multidisciplinar.

Fecha Elaboración resumen:

Día 6 Mes 09 Año 2010