

# Fluctuaciones térmicas y propiedades elásticas de membranas bicapas de fosfolípidos

Enrique Chacón<sup>1</sup>

*Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid, CSIC, 28049, Madrid, Spain and Instituto de Ciencia de Materiales Nicolás Cabrera, Universidad Autónoma de Madrid, Madrid, 28049, Spain*

Pedro Tarazona<sup>2</sup>

*Departamento de Física Teórica de la Materia Condensada, Universidad Autónoma de Madrid, Madrid, 28049, Spain and Instituto de Ciencia de Materiales Nicolás Cabrera, Universidad Autónoma de Madrid, Madrid, 28049, Spain*

Fernando Bresme<sup>3</sup>

*Department of Chemistry, Imperial College London, SW7 2AZ, London UK and Department of Chemistry, Norwegian University of Science and Technology, Trondheim, Norway*

Las membranas bicapas fosfolípicas son el principal componente estructural de las membranas biológicas. Sus propiedades elásticas juegan un papel fundamental en el anclaje, inserción y función de las proteínas. Las propiedades macroscópicas-mesoscópicas de la membrana están muy bien descritas por el hamiltoniano superficial efectivo de Helfrich. Dentro de este formalismo el módulo elástico de curvatura (bending),  $\kappa$ , es el parámetro más importante para describir la flexibilidad de las membranas biológicas. El problema es que los valores reportados de  $\kappa$  para una misma membrana, tanto experimentales como teóricos, pueden diferir de unos cálculos (medidas) a otros por un factor alrededor de 2, disparidad que lleva a comportamientos muy diferentes de la misma membrana. Por ello es importante desarrollar métodos que mejoren la precisión en la estimación de  $\kappa$ .

En este trabajo<sup>4</sup> se presenta un nuevo método para evaluar las propiedades elásticas de membranas biológicas en simulaciones numéricas. El método analiza las fluctuaciones térmicas en término del modo ondulatorio-acoplado, el cual extiende significativamente el rango de valores del vector de onda  $k$ , hacia  $k$  más altos, que puede ser usado para estimar  $\kappa$ , lo que permite un cálculo mucho más preciso del mismo. Este hecho adquiere gran relevancia si se tiene en cuenta que si hacemos simulaciones con áreas más grandes para ir hacia valores de  $k$  muy bajos, además del coste computacional prohibitivo, los resultados se contaminan con la aparición de fenómenos asociados a la compresibilidad de la membrana, que aunque es bastante incomprensible

no lo es del todo.

En los métodos anteriores es habitual describir las fluctuaciones de las membranas bicapas como la suma de tres modos; el modo ondulatorio que describe el movimiento de la posición media entre las dos capas; el modo peristáltico que describe los cambios locales en la anchura de la bicapa; y las protrusiones, movimientos desacoplados de las moléculas de cada capa. En el límite de vector de onda pequeño las ondulaciones dominan el espectro de fluctuaciones. En el caso de membranas libres la amplitud de las ondulaciones está controlada por el módulo elástico de curvatura  $\kappa$ , el cual, en simulaciones numéricas, puede ser evaluado a partir de la desviación cuadrática media de las amplitudes de las fluctuaciones. El problema es que el modo ondulatorio tradicional, basado en la posición media entre las dos capas, incluye contribuciones del tipo protrusión que contaminan el análisis para valores intermedios del vector de onda. Por el contrario nuestro análisis se basa en el modo ondulatorio-acoplado que describe el movimiento correlacionado de las dos capas, por lo que evita el problema anterior. Nuestro método también aporta una mejor caracterización del modo peristáltico en término de una energía elástica interna y de una contribución superficial.

---

<sup>1</sup> echacon@icmm.csic.es

<sup>2</sup> pedro.tarazona@uam.es

<sup>3</sup> f.bresme@imperial.ac.uk

<sup>4</sup> P. Tarazona, E. Chacón, and F. Bresme, *J. Chem. Phys.* **139**, 094902 (2013).