

PROPUESTA PARA AUXILIAR DE INVESTIGACIÓN

Nombre del NACT: División Polímeros Nanoestructurados (INTEMA)

Director del NACT: Cristina Hoppe

Tutor del auxiliar: Ezequiel Soulé

Proyecto de investigación en el que se enmarca la propuesta:

Proyecto UNMdP 15/G595: MATERIALES INTELIGENTES CON COMPONENTES ORGÁNICOS E INORGÁNICOS.

Descripción de las tareas a realizar (máximo 1 página):

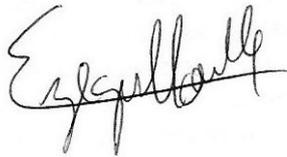
Modelado termodinámico de bi-capas lipídicas y membranas biológicas

Las membranas celulares están conformadas por una doble capa de fosfolípidos, que se auto-ensamblan en una estructura donde los grupos polares se ubican hacia el exterior de la membrana, y las cadenas hidrocarbonadas se extienden hacia el centro de la misma. Dentro de esta estructura general, pueden identificarse diferentes formas en que las moléculas se ordenan, constituyendo diferentes tipos de fases líquido-cristalinas. Por ejemplo, las cadenas hidrocarbonadas pueden ubicarse de manera desordenada o pueden presentar una orientación preferencial que puede ser perpendicular u oblicua respecto al plano central de la membrana; a su vez, en el plano de la membrana, las moléculas pueden estar ubicadas de manera desordenada o pueden presentar un orden posicional.[1]

Se propone el modelado termodinámico del sistema teniendo en cuenta diferentes tipos de orden posibles (orientación de las cadenas, orden posicional de los grupos polares, etc.) para analizar su estructura y transiciones de fases. Se tendrá en cuenta una publicación reciente que propone la formación de una fase hexática (orden posicional de tipo hexagonal, y orden orientacional de las cadenas hidrocarbonadas)[2], mediante una transición de fases de primer orden. Se planteará un modelo termodinámico para la fase hexática de la membrana, y se estudiarán las transiciones de fases a partir de la minimización de la energía libre. Se compararán las predicciones de la teoría con los resultados de las simulaciones de la ref. [2]. Se considerarán también las diferentes fases resultantes de diferentes combinaciones de orden posicional y orientacional.

Referencias

- [1] S. Tristram-Nagle and J. F. Nagle, "Lipid bilayers: Thermodynamics, structure, fluctuations, and interactions," *Chem. Phys. Lipids*, vol. 127, no. 1, pp. 3–14, 2004.
- [2] S. Katira, K. K. Mandadapu, S. Vaikuntanathan, B. Smit, and D. Chandler, "The order-disorder transition in model lipid bilayers is a first-order hexatic to liquid phase transition," pp. 1–8, 2015.



Firma del Tutor del Asistente



Firma del Director del NACT