

Simulaciones Monte Carlo de polímeros vivos con interacciones laterales en 2D

Alfonso Páez*, Pedro Tarazona, Enrique Velasco
 Departamento de Física Teórica de la Materia Condensada
 Universidad Autónoma de Madrid
 E-28049 Madrid

Los polímeros desempeñan un papel muy importante en muchos procesos biológicos, como por ejemplo la división celular. El anillo septal es una organela compuesta por multitud de polímeros que se forma durante el proceso de división celular en bacterias. Este anillo se forma en la cara interna de la membrana en el centro de la bacteria y es capaz de constreñirla para separarla en dos células independientes.

Hemos realizado simulaciones Monte Carlo de gran número de partículas con un grado de libertad orientacional y volumen excluido sobre una red triangular bidimensional. Estas partículas son capaces de formar dos enlaces fuertes en lados opuestos de la molécula (cabeza y cola) con otras partículas que estén suficientemente cerca y con orientación similar (enlaces de polimerización de energía U_{pol}) y cuya energía se ve corregida por la curvatura del filamento en ese punto (U_{tor}). Además, en nuestro modelo cada partícula puede formar un máximo de cuatro enlaces débiles (enlaces laterales de energía U_{lat}) con otras partículas cercanas sin que sea necesaria la correlación de orientaciones.

Las características del modelo propuesto le permiten formar polímeros al sobrepasar un valor de la densidad de moléculas (densidad crítica de polimerización) y que estos formen agregados por encima un valor superior de densidad (densidad crítica de agregación). Hemos estudiado las características de estos polímeros y agregados para distintos valores de los parámetros energéticos del modelo observando tres tipos de agregados diferentes:

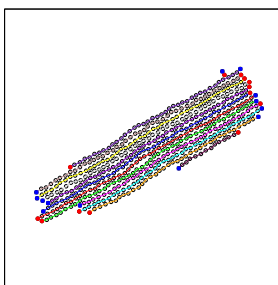


Figura 1. Fase I: Varios filamentos antiparalelos que cancelan la curvatura global del agregado.

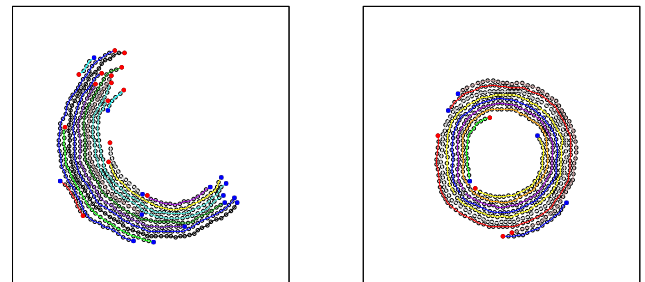


Figura 2. La fase C se forma por agregación de filamentos paralelos que mantienen la curvatura preferente de los polímeros individuales y fase O está compuesta por filamentos concéntricos, ciclados o en espiral.

Hemos estudiado además la estabilidad de las distintas fases para distintos valores de los parámetros energéticos comprobando que la fase ciclada (Fase O) es fuertemente metaestable.

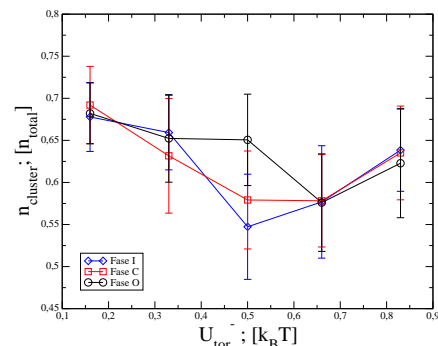


Figura 3. Fracción de partículas en las distintas fases condensadas para $U_{pol}=9.0$; $U_{lat}=0.85$; $U_{tor+}=9.0$; $[k_B T]$

* alfonso.paez@uam.es

- Hörger, I., Velasco, E., Mingorance, J., Rivas, G., Vélez, M., Tarazona, P. "Langevin Computer Simulations of bacterial protein filaments and the force generating mechanism during the cell division", Phys.Rev E 76 (2007)
- Sayar, M., Stupp, S. (2005). Physical review E. Assembly of one-dimensional supramolecular objects: From monomers to networks. DOI:10.1103/PhysRevE.72.011803.
- Mingorance, J., Tadros, M., Vicente, M., González, J.M., Rivas, G. and Vélez, M., (2005). Journal of Biological Chemistry. Visualization of Single Escherichia Coli FtsZ Filament Dynamics with Atomic Force Microscopy. 280: 20909-20914.