

Procedimiento para el Cálculo de los Perfiles de Estrés

31 de julio de 2020

1. Procedimiento

El siguiente procedimiento ha sido realizado para 5 réplicas de 400ns hechas sobre cada una de los siguientes sistemas: DMPG, DPPG, 1STX:128DMPG, 1STX:128DPPG, 15 %STX en DMPG, 15 %STX en DPPG, 15 %STXrígida en DMPG, 15 %STXrígida en DPPG.

- Se modificó el archivo `.mdp` fijando las opciones de número de pasos, `nst`, a 0. La opción de `coulombtype` se colocó como `Cut-off` y la distancia de cutoff, `rcoulomb` se fijó a 2.0nm.

Luego se creó el archivo `.tpr`, mediante las herramientas de gromacs de la siguiente manera:

- Se creó un archivo `.ndx` que contiene los grupos de la membrana y del solvente unido con los iones.
- Los sistemas de membrana fueron trasladados 3.7 nm para los sistemas con STX. Para trasladarlos se utilizó el comando `gmxd editconf` de gromacs 2016.3 y posteriormente se convirtió a formato `tpr`.
- Con `trjconv -fit traslation...` se ajusta la membrana.
- A partir del archivo `trr` se calculó el tensor de estrés a lo largo de la coordenada `z`. Se usó el siguiente comando:

```
gmxd mdrun -s step7_LS.tpr -rerun traj_centered.trr -localsgrid 0.05  
-lsgridx 1 -lsgridy 1 -ols localstress.dat0
```

La salida del comando es un archivo binario `.dat0`.

- Tomando el archivo .dat0, se generó un archivo .txt que contiene el tensor de estrés por cada coordenada z. Mediante la herramienta `tensorools` a estos valores se les aplica un filtro gaussiano de 2,3 y 4 desviaciones estándar. Sin embargo, fueron escogidos los valores con el filtro gaussiano de 2 desviaciones al considerando el hecho de que se descartaban los valores más atípicos del perfil de estrés, pero se conservaban las fluctuaciones propias del sistema.
- Con el tensor de estrés filtrado, se calcula el perfil de estrés mediante la fórmula:

$$\Pi(z) = -(\sigma_{xx} + \sigma_{yy})/2 + \sigma_{zz} \quad (1)$$

- El perfil de estrés es calculado para cada una de las réplicas. Con estos valores de perfil de estrés se realiza un promedio sobre todas las réplicas y se realiza una simetrización del perfil de estrés obtenido, es decir, se promedian las coordenadas que están a la derecha y a la izquierda del centro de la membrana.

2. Resultado

En la figura 1 aparecen los perfiles de estrés obtenidos para cada uno de los sistemas siguiendo los pasos anteriores:

En la figura 1, la línea punteada representa la posición de los grupos fosfato hallada mediante la herramienta de gromacs. Los dos máximos positivos del perfil de presión (picos positivos) corresponden a la posición de los grupos fosfato, esto es debido a la repulsión electrostática entre los fósforos, los cuales poseen cargas aniónicas, lo cual induce un trabajo positivo sobre el sistema, sin embargo, en la figura 1 la posición de los grupos fosfato de gromacs aparece desplazada hacia el centro respecto a los picos correspondientes.

Los dos mínimos globales del perfil de presión (valles negativos) son valores negativos puesto que se deben a interacciones favorables entre los grupos apolares de la membrana debido a interacciones hidrofóbicas y que usualmente corresponden a interacciones en la interfaz hidrofílica/hidrofóbica de la membrana. Los dos valles encontrados son acordes a los resultados de Vanegas et. al., ya que estos dos valles son más notorios cuando la membrana está en la fase líquida desordenada L_α .

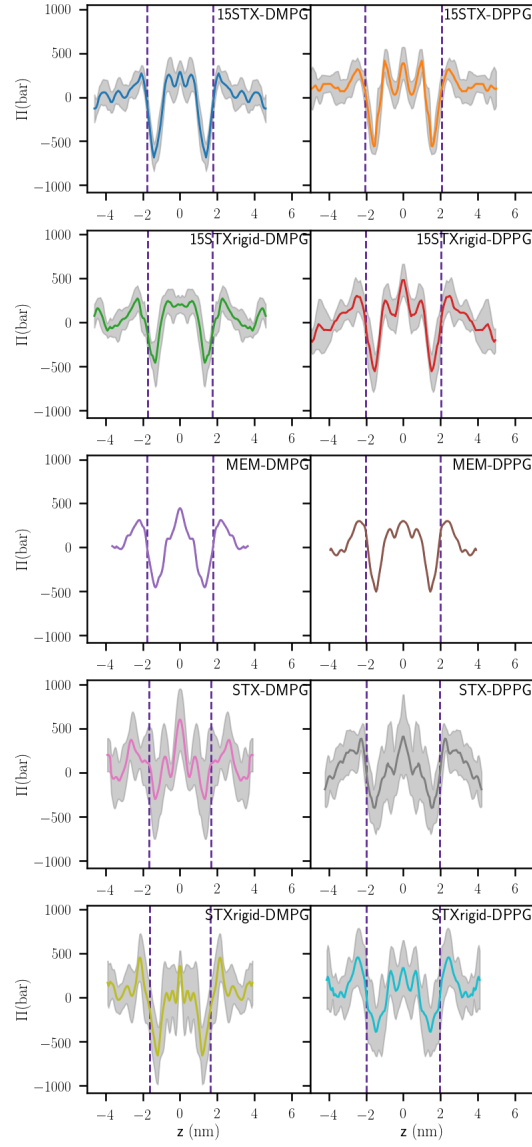


Figura 1: Perfil de estrés promediado para todas las réplicas con un filtro gaussiano de 2. Las líneas punteadas representan la posición de los grupos fosfato.