



Universiteit
Leiden
The Netherlands

On shape and elasticity: bio-sheets, curved crystals, and odd droplets

Garcia Aguilar, I.R.

Citation

Garcia Aguilar, I. R. (2022, September 13). *On shape and elasticity: bio-sheets, curved crystals, and odd droplets*. *Casimir PhD Series*. Retrieved from <https://hdl.handle.net/1887/3458390>

Version: Publisher's Version

License: [Licence agreement concerning inclusion of doctoral thesis in the Institutional Repository of the University of Leiden](#)

Downloaded from: <https://hdl.handle.net/1887/3458390>

Note: To cite this publication please use the final published version (if applicable).

Resumen

No es posible doblar una hoja de papel carta a la mitad – a lo largo y a lo ancho – más de siete veces, ya que se vuelve muy gruesa, comparado con las otras dos dimensiones, para lograr doblarla una vez más. Este ejercicio sencillo de hacer, es una manera de experimentar la conexión entre el espesor de un objeto y la facilidad con que se puede doblar hacia afuera del plano. Al ser efectivamente bidimensionales, los sistemas sólidos y delgados, como la hoja de papel sin doblar, se pueden moldear con relativa facilidad para formar todo tipo de estructuras tridimensionales. La forma que adquieren estos sistemas es por ende una expresión de su mecánica o, en otras palabras, ésta resulta de las fuerzas externas y/o las interacciones al interior del material.

En esta tesis, nos sumergimos en el estudio de fenómenos físicos relaciones al remodelado de láminas delgadas y cascarones huecos microscópicos, específicamente: láminas abiertas hechas de una molécula en las células, cascarones cristalinos bidimensionales, y la interfaz de gotas con formas peculiares. Estos sistemas, además de ser interesantes en sí mismos y de interés en áreas más allá de la física fundamental, son óptimos para estudiar el efecto de la geometría, local y global, en la mecánica de materiales bidimensionales. Y viceversa, es divertido ver qué tipo de formas inesperadas surgen de la interacción entre pocos ingredientes mecánicos. Al ser sólidos elásticos, los materiales muestran resistencia a deformaciones locales, la cuál se expresa como estrés dentro del material. Al ser delgados, y por ende fáciles de doblar, hay un desacople entre el costo de las deformaciones en el plano y aquellas afuera del plano. En otras palabras, la energía elástica tiene dos contribuciones: (i) la energía de estiramiento de extender o comprimir la superficie, similar a una sábana que se estira para ajustarla al colchón plano, y (ii) la energía de flexión, o similar a enrollar una hoja de papel fuera del plano. En realidad, la elasticidad de los sistemas estudiados en este trabajo se encuentran en un punto entre la tela y el papel; al moldearlos, ofrecen resistencia tanto al estiramiento como a la flexión.

En muchos casos, las deformaciones de los sistemas delgados ocurren por estrés local preexistente en el material, por ejemplo, a raíz de la disposición de los componentes del material o sus interacciones. Un ejemplo interesante de esto, incluido en esta tesis, son estructuras ensambladas a partir de tubulina que contienen curvatura espontánea, es decir, la curvatura superficial que reduce el estrés y minimiza la energía de flexión. La tubulina es una proteína redonda presente en casi todas las células vivas, donde pares se ligan, formando dímeros. Estos dímeros pueden ensamblarse en una variedad de estructuras más grandes al agregarse verticalmente, como bloques de Lego, y también asociarse horizontalmente, formando membranas delgadas. Aunque se han observado membranas planas de tubulina, la estructura más común y mejor investigada son cilindros huecos llamados microtúbulos, indispensables para un sinnúmero de procesos biológicos. A diferencia del Lego clásico, los dímeros de tubu-

lina son efectivamente asimétricos: a lo horizontal tienen forma de cuña induciendo el cierre cilíndrico, mientras que un quiebre vertical en la molécula genera estrés de curvatura radial hacia el exterior. La flexibilidad y el ángulo de quiebre en el dímero se ven afectados por el medio químico, o, siguiendo nuestra analogía, éste altera la forma de los bloques. Consecuentemente, nuestra hipótesis es que estas alteraciones están detrás de la variabilidad estructural de los ensamblajes de tubulina, ya que varias otras geometrías se han observado, pero han sido considerablemente menos estudiadas. Éstas incluyen láminas largas dobladas en forma de “C”, aros con una o varias capas, y tiras con forma de hélice de curvatura variable. Considerando un modelo mínimo que incluye la anisotropía de la curvatura intrínseca de los dímeros, usamos simulaciones numéricas para descubrir qué formas surgen al cambiar la mecánica interna de láminas elásticas de tubulina (ver Figura S1). Esto nos permitió entender mejor por qué las formas relacionadas a los microtúbulos, como cilíndricas y tal, son prevalentes en los ensamblajes de tubulina y cómo esto resulta en polimorfismo.

Regresando a la energía elástica, aunque el estiramiento y la flexión están desacoplados en su cuantificación, en realidad los mecanismos físicos relacionados a ambos están conectados y a menudo incluso en competencia. Por ejemplo, veamos un cristal bidimensional, o sea, una monocapa sólida cuyos componentes están organizados en una red con orden definido. En particular, imagine una malla donde cada punto está conectado a seis vecinos a la misma distancia, o equivalentemente, un mosaico de hexágonos regulares. Mientras que las láminas planas pueden tener una red hexagonal perfecta (como la portada exterior trasera de este libro), lo mismo no es cierto para cristales cerrados, como un cascarón esférico. Dada la manera en que una esfera bidimensional se curva en el espacio tridimensional, es matemáticamente imposible recubrirla usando sólo hexágonos regulares, y como resultado hay puntos en la red que no tienen seis vecinos. A este tipo de defecto se le conoce como disclinación y la distorsión que conllevan introduce estiramiento en el plano. Similar a las cintas de tubulina, el cristal curvo tiene pre-estrés, pero no por la forma efectiva de los componentes, sino por su disposición con respecto al resto. La mejor manera de acomodar la incómoda restricción matemática es teniendo doce disclinaciones pentagonales, distanciadas al máximo (ver Figura S2). El típico ejemplo de frustración geométrica en la esfera son los doce parches pentagonales en una bola de fútbol. Sin embargo, esto no es suficiente para deshacerse de todo el estrés elástico, y otros mecanismos de apantallamiento del estrés se han observado en cristales esféricos. Uno de ellos es el pandeo hacia afuera de la superficie alrededor de las disclinaciones, a cambio de incrementar la energía de flexión. Como resultado, la esfera se transforma en un icosaedro – el poliedro de 12 vértices – para poder compensar por la abertura angular creada por la falta de un vecino. Si la esfera es pequeña en comparación con la distancia entre puntos de la red (cristal de baja densidad), y por ende muy curva, el pandeo no vale el costo de flexión. Sin embargo, el estrés de la disclinación escala con el número de puntos en la red, y cristales más grandes expresan geometrías icosaédricas. La envoltura que encapsula el material genético de los virus es un ejemplo de este mecanismo: los cápsides pequeños son esféricos mientras que los grandes son icosaédricos. Empero, en cristales mucho más densos, la región inmediata a la disclinación se ve relativamente plana (similar a caminos planos sobre la superficie de

la tierra), y en ellos existe un segundo mecanismo de apantallamiento. Tal vez poco intuitivo, otra manera de reducir el estrés es introduciendo aún más defectos en el cristal que el mínimo necesario. El truco está en cuáles y en dónde. La distorsión causada por las disclinaciones pentagonales iniciales se puede relajar al formar líneas de defectos saliendo de estas, alternando heptágonos con pentágonos, a las cuales nos referimos como pliegues de dislocaciones.

Por el momento nos hemos enfocado en las complejidades entre la elasticidad de una superficie y la forma que tiene. Sin embargo, la energía elástica muchas veces no es la única contribución relevante a la mecánica total del sistema. Un ejemplo fascinante se encuentra en unas emulsiones particulares, recientemente investigadas. Estas gotas microscópicas están estabilizadas dentro de una solución acuosa por agentes tensioactivos o surfactantes en su superficie. Con la química correcta, la monocapa superficial se puede congelar, conservando el agua y el aceite en estado líquido, formando un cristal efectivamente bidimensional. En contraste con la típica gota suspendida, la cuál es esférica gracias a la tensión superficial, estas emulsiones de interfaz sólida pasan por una serie sorprendente de transformaciones geométricas al enfriar progresivamente el sistema, ya que la tensión superficial disminuye. La gota inicialmente redonda se dobla en un icosaedro, el cual luego se aplanar en una plaqueta hexagonal, y consecuentemente se sigue deformando en otras formas poliedras planas específicas (ver Figura S3). En esta tesis buscamos descifrar los mecanismos físicos detrás de las primeras dos transformaciones: el pandeo inicial y aplanamiento de las gotas. Similar a la deformación de un globo con agua, las geometrías observadas en las gotas son el resultado de deformar su interfaz superficial, y por ende construimos un modelo que describe su mecánica bidimensional y que nos permite entender su física.

Aunque la deformación inicial a un icosaedro inmediatamente apunta al apantallamiento por pandeo de las disclinaciones, surgieron dos detalles importantes a considerar. El primero se relaciona con el cristal denso formado en la interfaz de las gotas. Dada la razón entre el tamaño de las gotas y el tamaño de las moléculas tensioactivas, uno esperaría encontrar pliegues de dislocaciones. Aún así, el pandeo ocurre y desafortunadamente la red es demasiado pequeña para ser visualizada con el microscopio. Además, los modelos teóricos y computacionales existentes para estudiar el estrés de defectos de red en cristales esféricos estaban basados en sistemas con muchos menos componentes y por ende inviables en nuestro estudio. Esto motivó la creación de un esquema nuevo que considerara la conexión entre curvatura y relajación del estrés alrededor de un set discreto de disclinaciones que a su vez están rodeadas por un número arbitrario y grande de dislocaciones. El segundo detalle es que, a diferencia de los cápsides virales, las gotas pequeñas tienen forma de icosaedro mientras que las grandes permanecen esféricas. Sin embargo, habiendo construido un esquema apropiado para cristales densos y después de investigar cómo las transformaciones dependen del tamaño inicial de la gota, nuestro modelo reveló que en realidad hay cuatro ingredientes mecánicos principales: (i) tensión superficial modulada por la temperatura, (ii) fuerza boyante presionando las gotas contra el portaobjetos del microscopio, y la elasticidad de la interfaz sólida, incluyendo (iii) la curvatura espontánea de los surfactantes con forma cónica y (iv) el estrés en el plano a causa de los defectos inevitables en el cristal curvo; el paquete completo.

Los cristales curvos en monocapas, la interfaz congelada de gotas emulsificadas y las láminas polimórficas de tubulina son en esencia todas expresiones fascinantes de la interacción entre geometría y la mecánica de sólidos delgados elásticos. Por lo tanto, en el **Capítulo 1** empezamos con una introducción conceptual a la descripción de la forma y la elasticidad de membranas sólidas, y cómo estas están íntimamente conectadas a través de los detalles microscópicos de los constituyentes en el material. En el **Capítulo 2** damos definiciones matemáticas formales a estos conceptos en superficies bidimensionales en tres dimensiones, las cuales son los objetos de estudio principales en esta tesis. Sobre una base de geometría diferencial y teoría de elasticidad lineal, construimos los modelos detrás de la energía de estiramiento y de flexión de superficies curvas, y explicamos cómo traducir éstas en superficies discretas, necesarias para modelaje computacional tridimensional. En el **Capítulo 3**, construimos y exploramos un modelo semi-continuo de defectos en cristales densos de geometrías cerradas, incluyendo formas icosaédricas. Además de generalizar resultados previamente obtenidos para cristales esféricos, la implementación pudo fácilmente ser exportada para el estudio de gotas con formas inusuales. En el **Capítulo 4** presentamos el estudio sencillo pero copioso de la mecánica de las gotas deformables y explicamos los resultados en el contexto de investigación previa. Por último, en el **Capítulo 5** presentamos los resultados en la formas esperadas e inesperadas que una lámina biológica puede adquirir cuando expuesta a estrés interno variable, expresado como curvatura espontánea, siendo este el primer estudio computacional en polimorfismo de tubulina.

Figura S1: Láminas biológicas. Una lámina delgada construida con componentes pequeños, como por ejemplo biomoléculas, adquiere diferentes geometrías dependiendo de la forma y las interacciones entre esos componentes. En este trabajo, usamos simulaciones computacionales para investigar esas geometrías.

Figura S2: Cristales curvos. Un cristal con orden hexagonal está forzado matemáticamente a tener defectos de orden pentagonal, llamados disclinaciones (puntos rojos), similar a los parches pentagonales en una bola de fútbol, independientemente del número de puntos en la red. Aún cuando no es posible ver la estructura de red explícita, como es el caso de la interfaz sólida de emulsiones deformables, el estrés inevitable de las disclinaciones se expande a través de la superficie, acá representado por las manchas claras. Nosotros exploramos dos mecanismos de apantallamiento del estrés, donde el aumento de la curvatura local, acá ejemplificada, es uno de ellos.

Figura S3: Gotas inusuales. Gotas líquidas microscópicas expresan una serie fascinante de transformaciones cuando están estabilizadas por una monocapa sólida en su interfaz, la cual incluye formas icosaédricas y hexagonales. Nosotros estudiamos la mecánica de membranas delgadas, como por ejemplo la interfaz sólida, usando modelaje computacional en tres dimensiones.