

Ondas de choque (en sólidos, células y biomoléculas)

Luis Moraga, Gonzalo Gutiérrez +
invitados

Facultad de Ciencias, Universidad de Chile, 2008

www.gnm.cl

Físicos y ondas de choque

Experimentos con el generador
de ondas de choque

(Lab. de Sólidos: Prof. Luis
Moraga, Dr. Pablo Encina)

Simulación de ondas de choque

(Grupo de NanoMateriales: GG,
Proyecto Anillo ACT-24 "Computer
simulation lab for nanobio
systems)

Plan de la presentación

0. Nuestro grupo

- ¿Que son las ondas de choque?

2. ¿Cuáles son los tamaños característicos de los sistemas en estudio?

3. ¿Que es simulación computacional?

4. Ejemplos selectos

5. Conclusión

Referencia:

Cell and biomolecular mechanics in silico,

A. Vaziri and A. Gopinath

Nature materials 2007.

Grupo de Simulación de NanoMateriales

- Eduardo Menéndez (UChile): Semiconductores, puntos cuánticos. Cálculos ab-initio: estructura electrónica, fonones, constantes elásticas.
 - Walter Orellana (UNAB): Cálculos ab-initio, semiconductores, superficies. Fullerenos.
 - David Laroze (PUCV): Sistemas Magnéticos.
- 6 estudiantes de doctorado, 3 magister, estud. Pregrado.

Support: Anillo ACT24-Chile, AFORS, Fondecyt-Chile

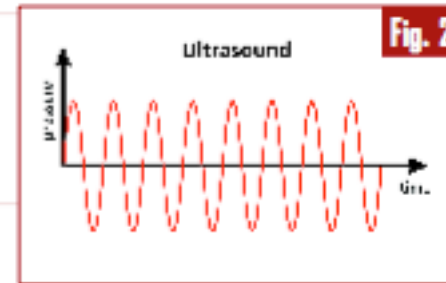
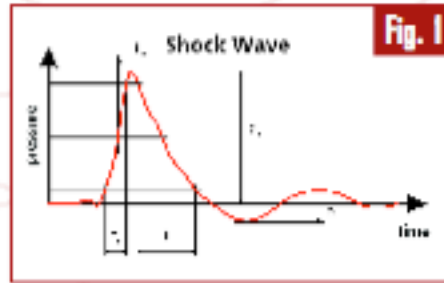
Colaboración con:

Center for the Study of Materials at Extreme Conditions,
CESMEC, Florida International University.

Colaboratory for Advanced Computer Simulations, CACS
University of Southern California.

Condensed Matter Theory Group, Uppsala University.
ICTP, Trieste.

Ondas de choque

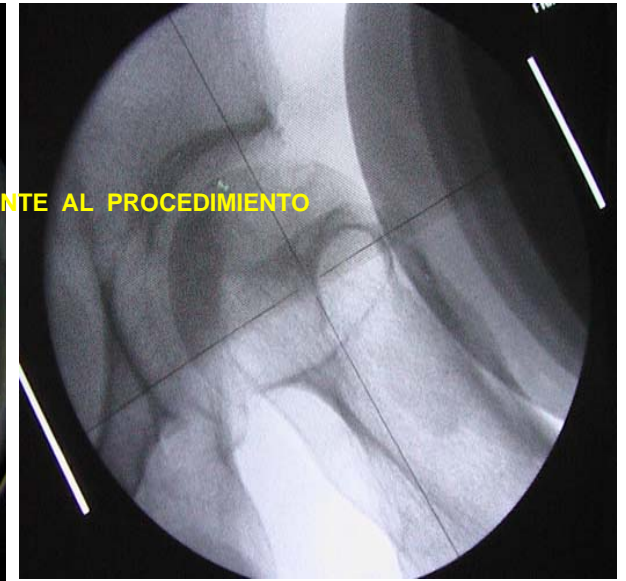
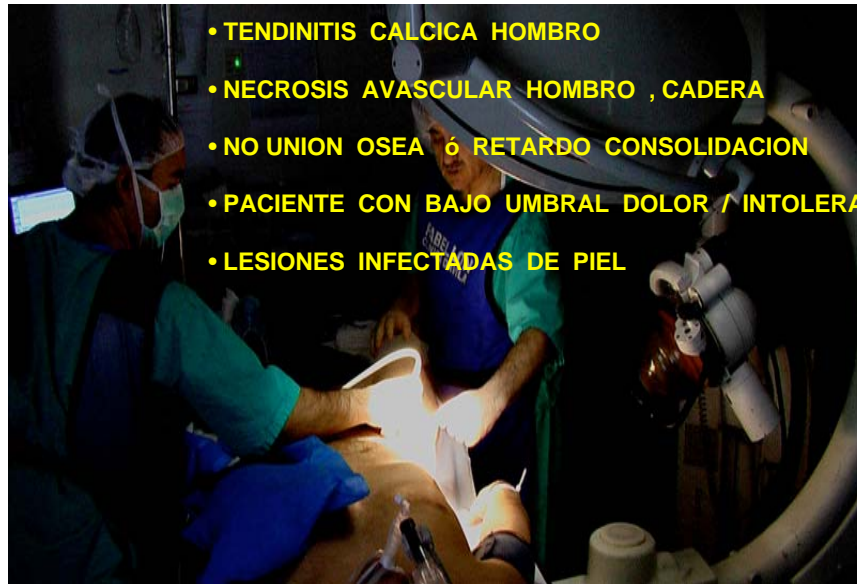


In comparison to shock waves, ultrasound is represented by a periodic oscillation of a limited duration.

- Un pulso contiene frecuencias desde kilohertz a 10 megahertz
- la subida de presión se produce en unos pocos nanosegundos
- en el peak de presión esta es de 10-150 Mpa
- el pulso dura unos 0.3-0.5 microseg.

- **Procedimiento A : Pabellón / Anestesia / Intensificador Imagen**

Uso ondas de Choque en medicina

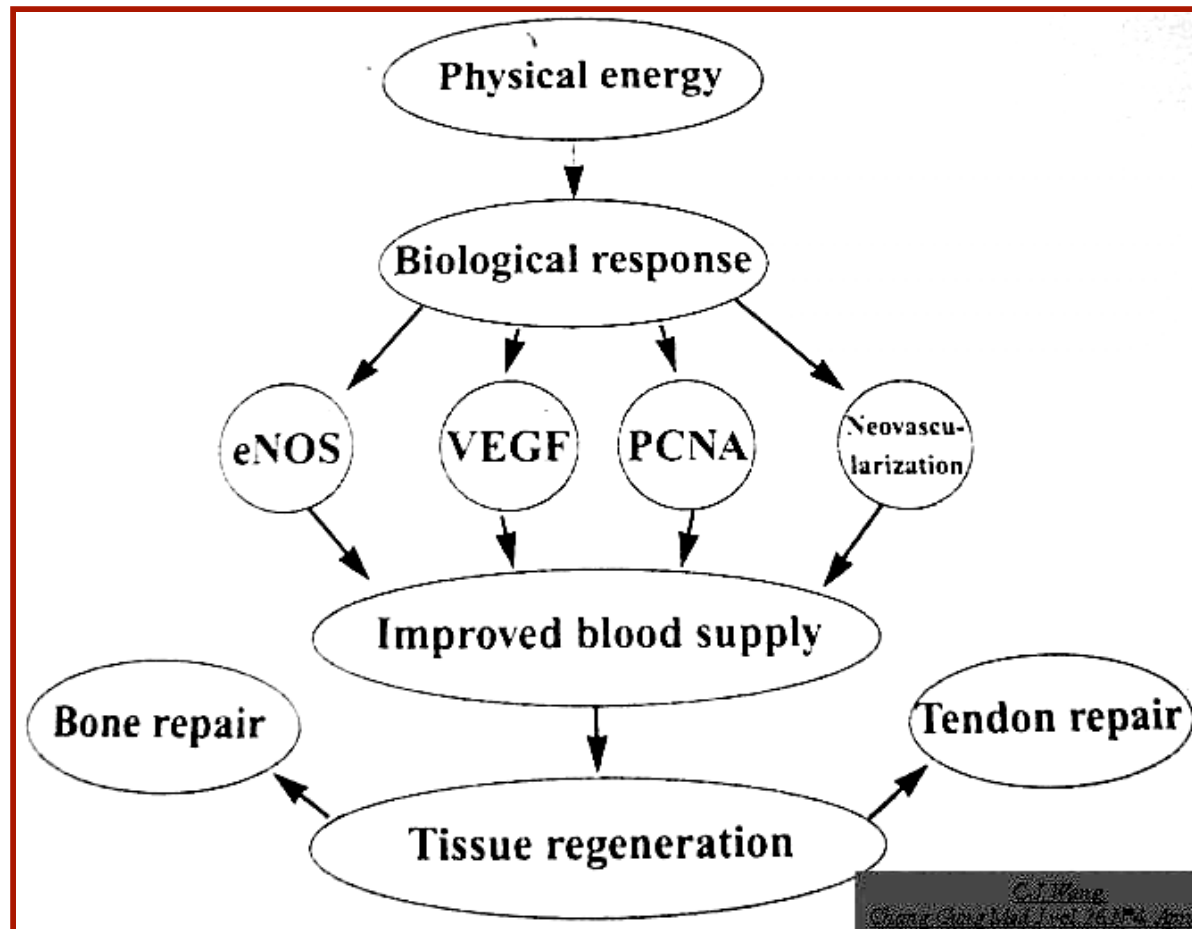


- **Procedimiento B : Sala Procedimiento / No Anestesia**

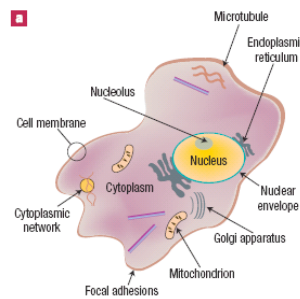
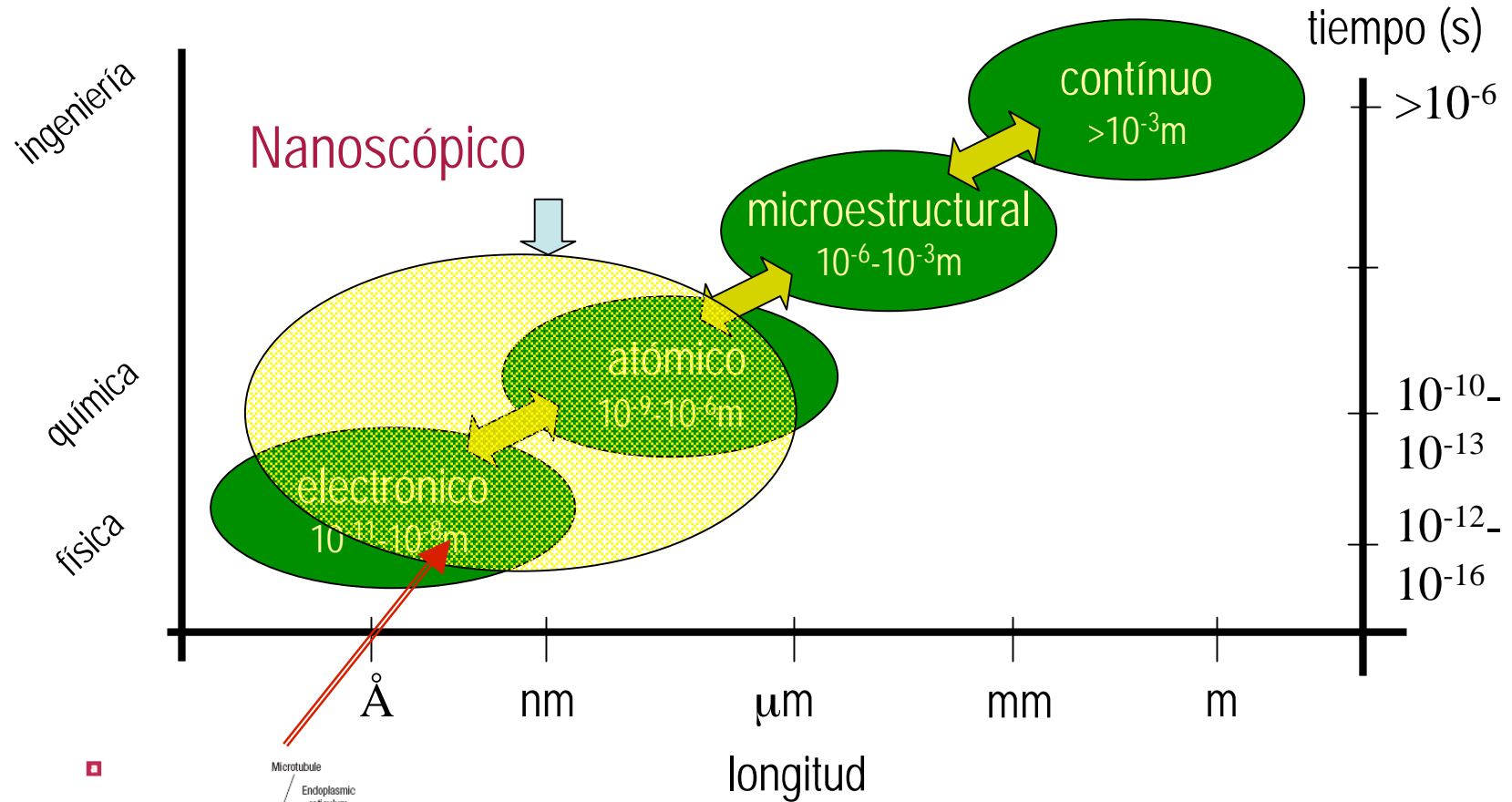


- LESIONES TENDINO – OSEAS :
 - CODO , MUÑECA , MANO
 - RODILLA , TOBILLO , PIE
- REVASCULARIZACION EXTREMI DADES INFERIORES

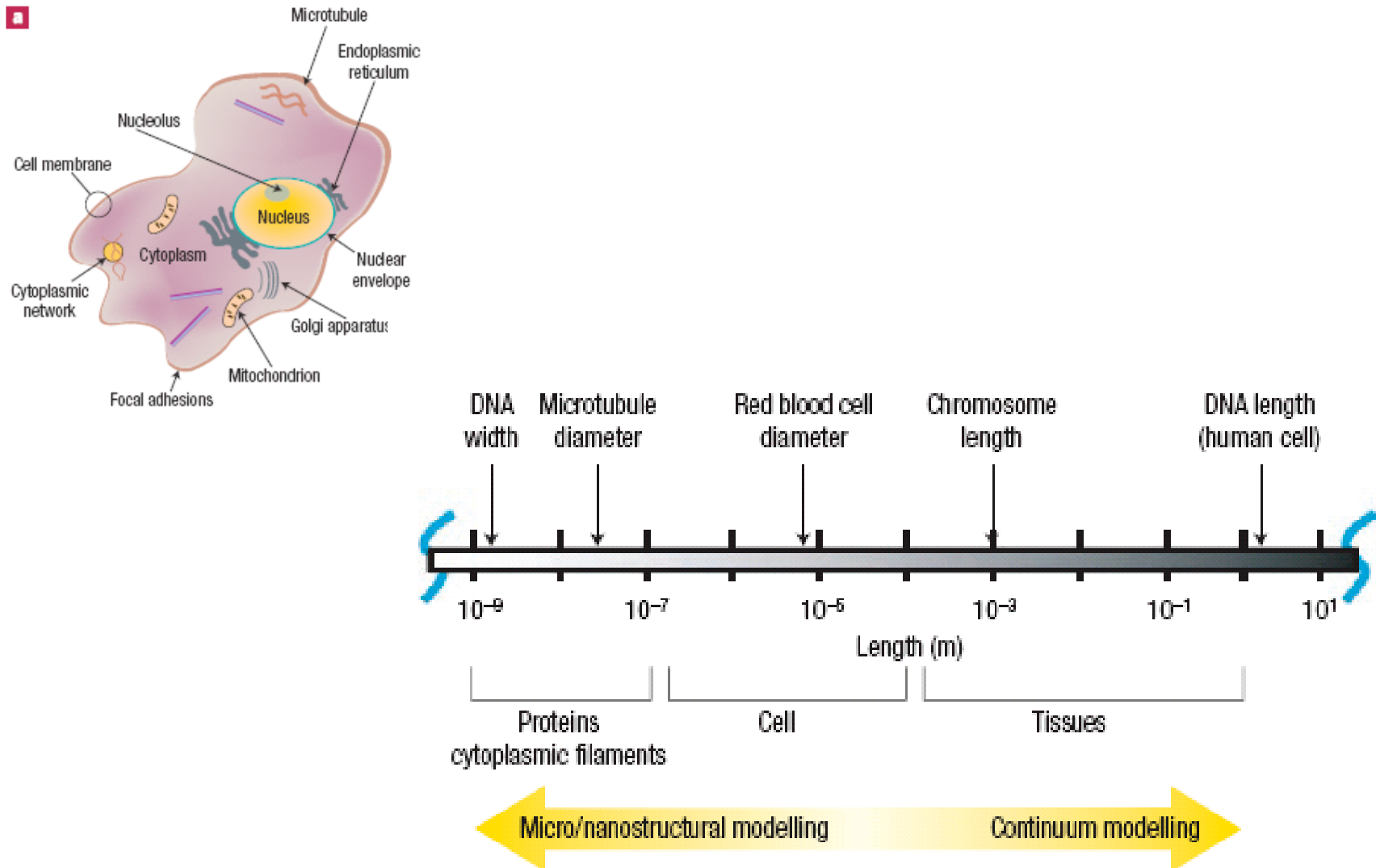
Ondas de choque



Escales típicas de longitud y tiempo

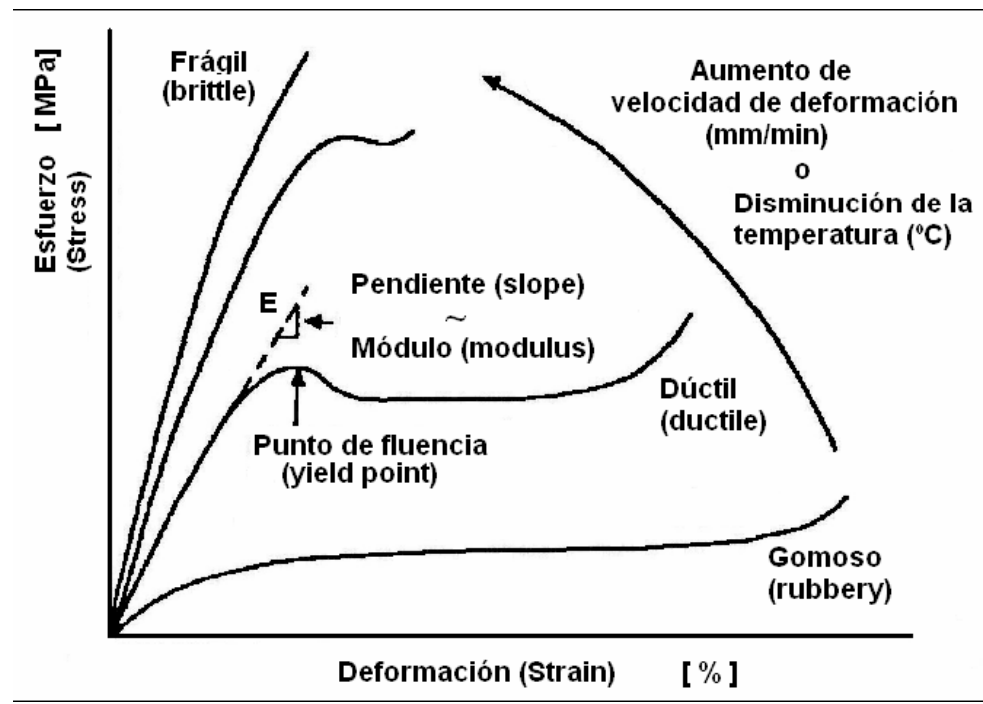
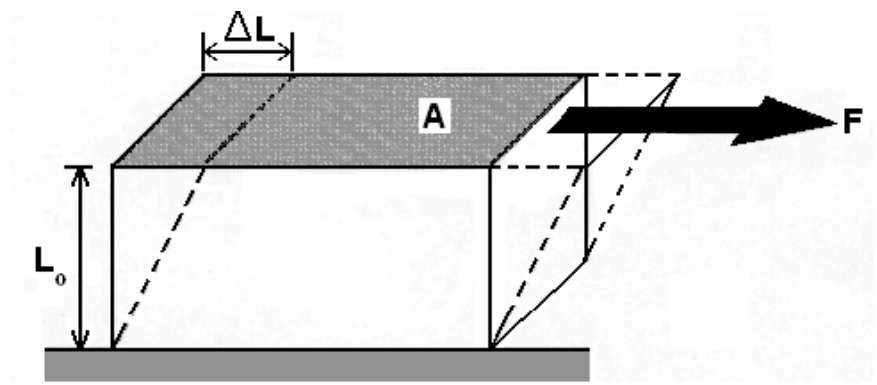
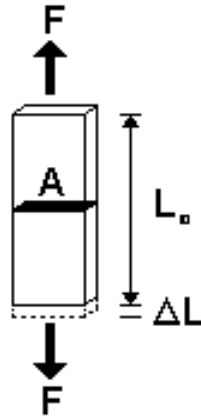


Escales típicas de longitud y tiempo



Ondas de choque cambian las propiedades mecánicas de materiales

Paradigma estructura-función:
“conoce la estructura y conocerás la función”



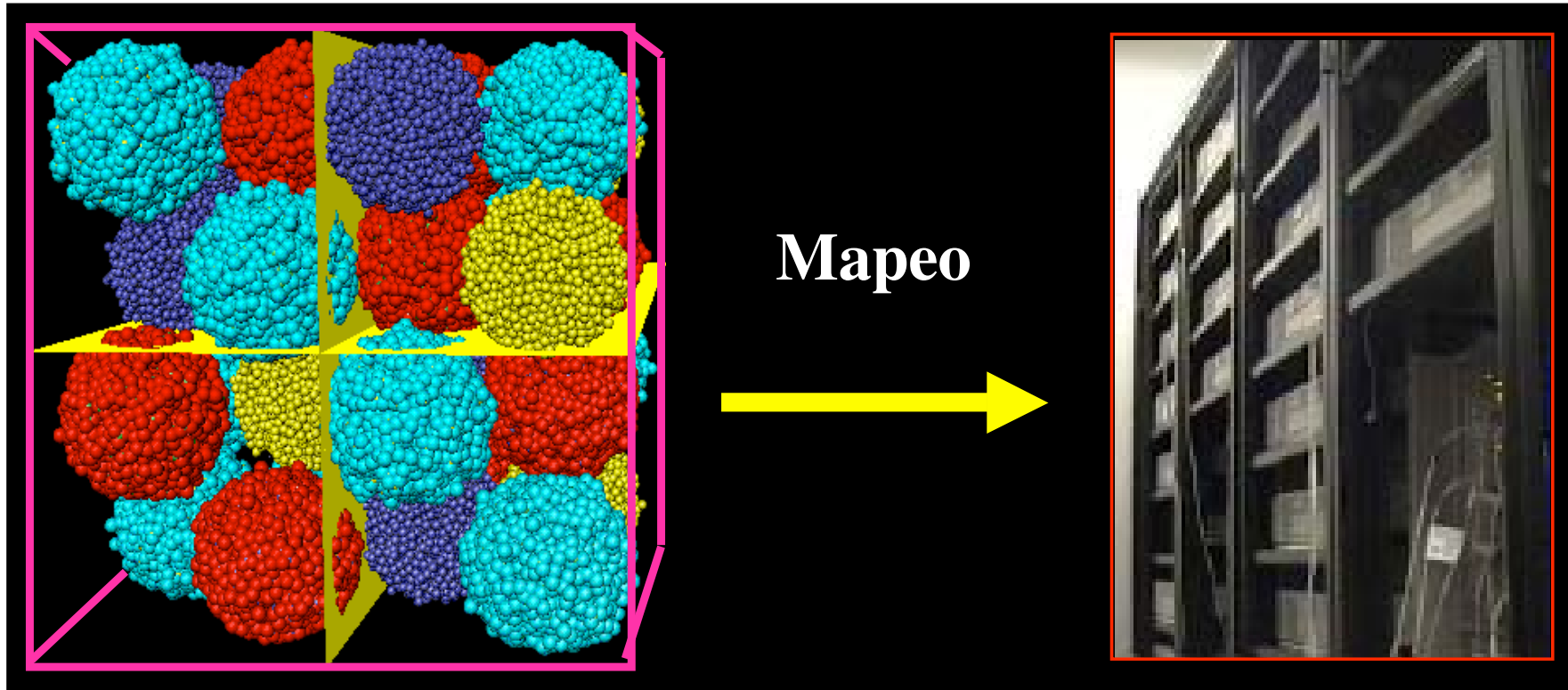
Ondas de choque: ¿cómo estudiarlas?

Experimentos

Teoría

Simulación

Simulación computacional



(CACS, USC.)

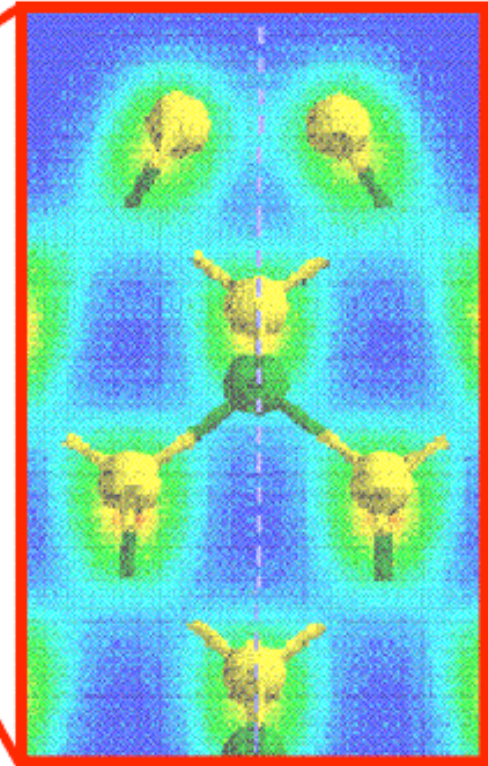
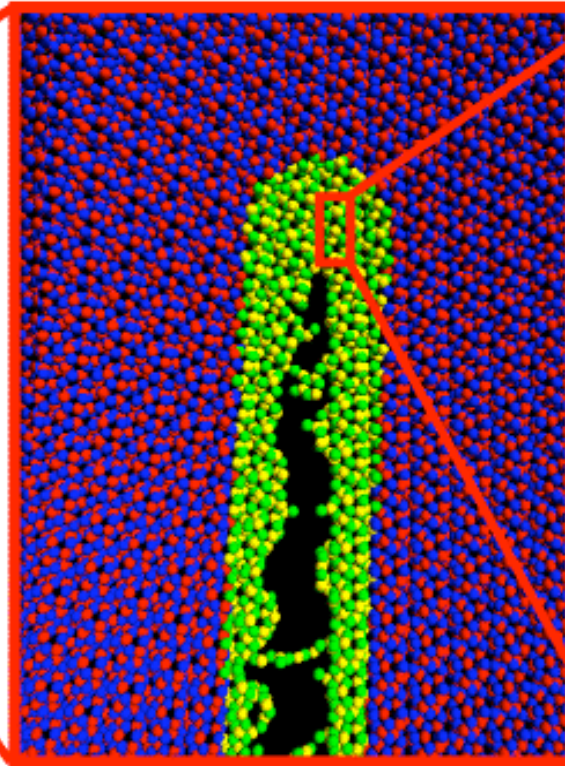
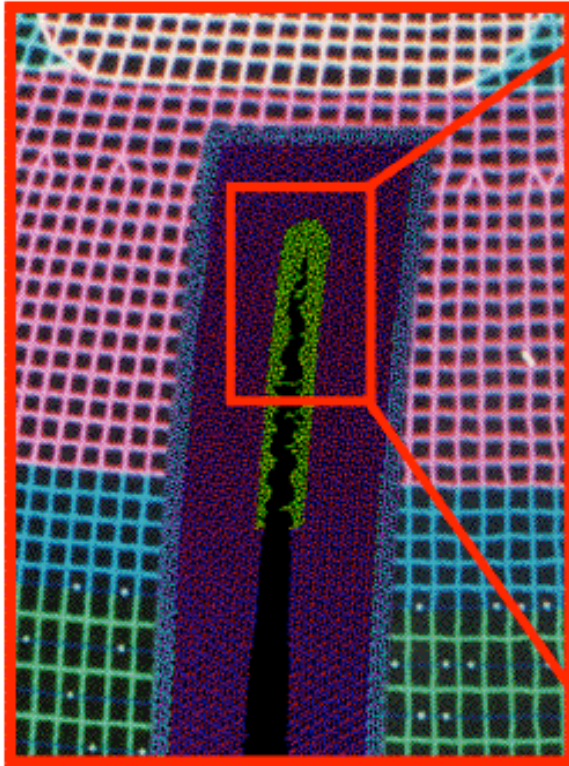
Sistema real – modelo – algoritmo – programa computacional

Simulación multiescala

Finite Element Simulation
Continuum Elasticity

Atomistic Simulation
Newton's Equation

Electronic Simulation
Schrödinger's Equation



Finite Element + 10^9 -atom MD + 10^4 -atom DFT

26 sec/step on 1,024 T3E

2 hr/step on 1,024 T3E

(CACS, USC)

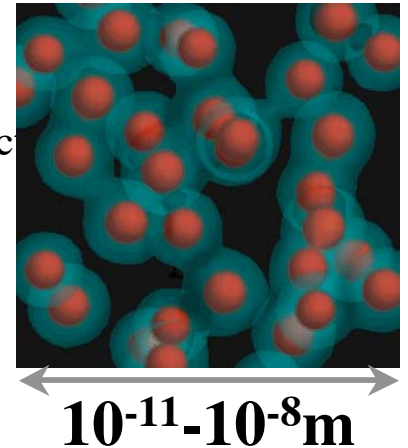
Metodologías

- **Mecánica Cuántica (Density Functional Theory)**

Funciones de onda electrónica: $\{\psi_n(\mathbf{r}) \mid n = 1, \dots, N_{\text{elec}}\}$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{x}^2} + V_{\text{ion}}(\mathbf{x}) + \int d^3x' \frac{e^2 \rho(\mathbf{x}')}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} + \frac{\delta E_{\text{XC}}}{\delta \rho(\mathbf{x})} \right] \psi_n(\mathbf{x}) = \varepsilon_n \psi_n(\mathbf{x})$$

$$\rho(\mathbf{x}) = \sum_n |\psi_n(\mathbf{x})|^2; \quad \int d^3x \psi_m^*(\mathbf{x}) \psi_n(\mathbf{x}) = \delta_{mn}$$

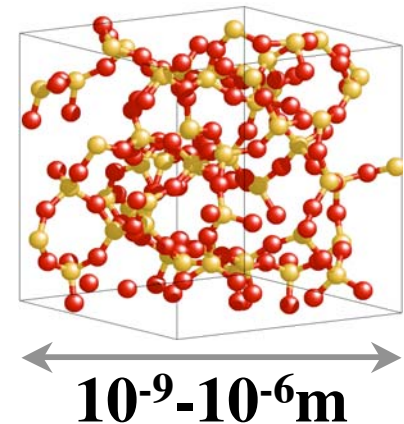
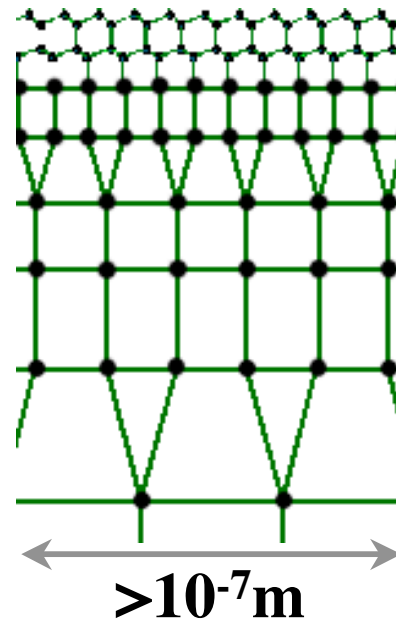


- **Dinámica Molecular**

Traectorias Atómicas: $\{\mathbf{r}_i(t) \mid i = 1, \dots, N_{\text{atom}}\}$

$$m_i \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = - \frac{\partial V(\mathbf{r}^N)}{\partial \mathbf{r}_i}$$

Ensembles; funciones correlación



- **Mecánica del continuo**

Campos de desplazamiento: $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$

$$\rho \frac{d^2 \mathbf{u}}{dt^2} = - \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \cdot \vec{\sigma}$$

Structural Change in Lipid Bilayers and Water Penetration Induced by Shock Waves: Molecular Dynamics Simulations

Kenichiro Koshiyama,* Tetsuya Kodama,[†] Takeru Yano,* and Shigeo Fujikawa*

*Division of Mechanical and Space Engineering, Hokkaido University, Sapporo, Japan; and [†]Biomedical Engineering Research Organization, Tohoku University, Sendai, Japan

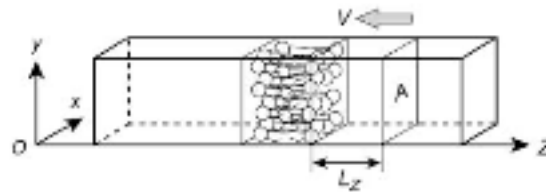
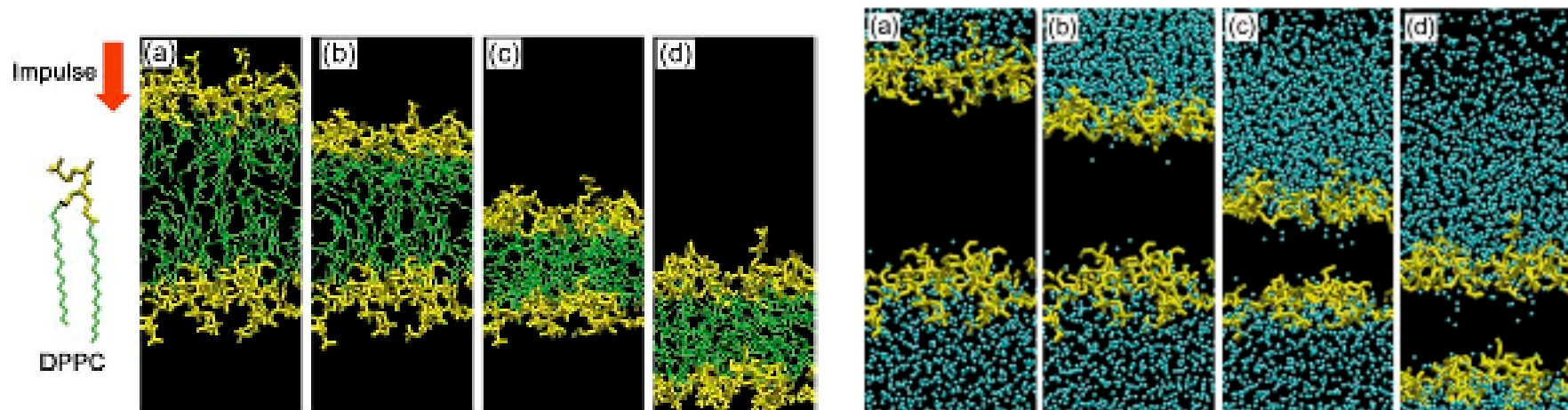
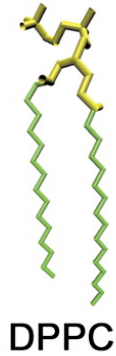


FIGURE 2 Schematic of the initial configuration of shock wave simulation. The average velocity V defined by Eq. 3 is added to water molecules in a volume $A \times L_z$, where A is the cross-sectional area of simulation box, and $L_z = 4$ nm. The *NVE* MD simulations were performed from this initial configuration.

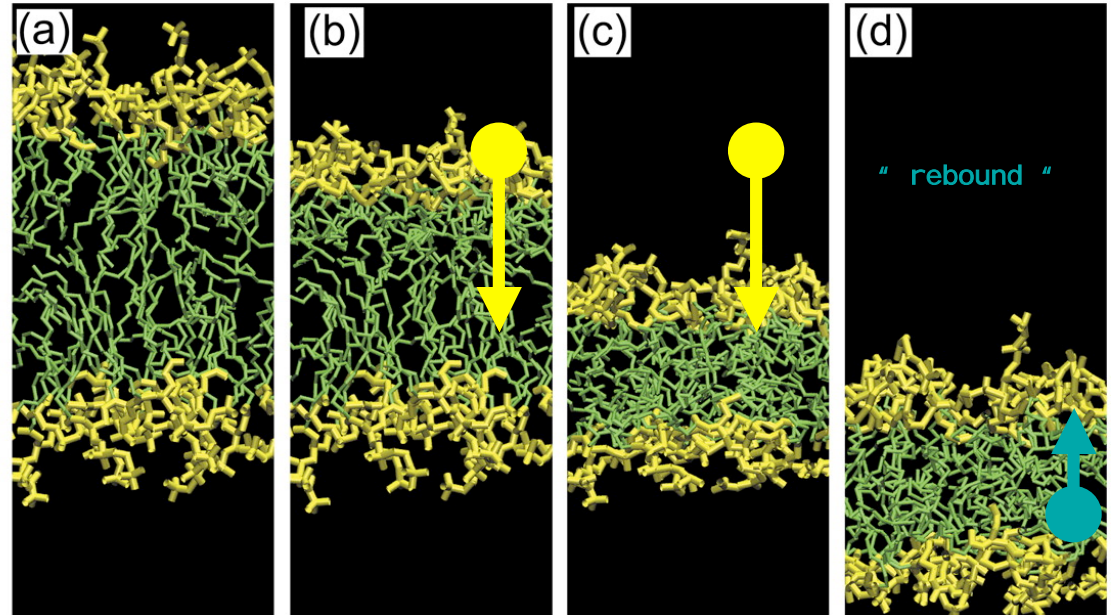


$I = 50 \text{ MPa/s}$

DPPC
di pal mi tol fosphati dyl chol i ne

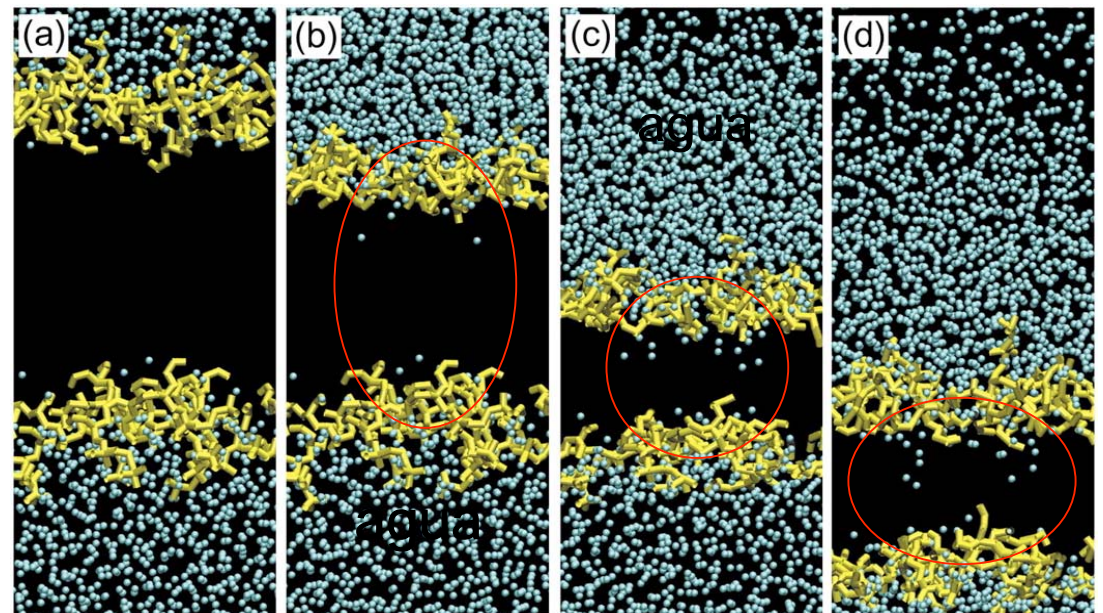


Impulse

Efecto de las ondas de choque en una capa bi-lipídica simulada :

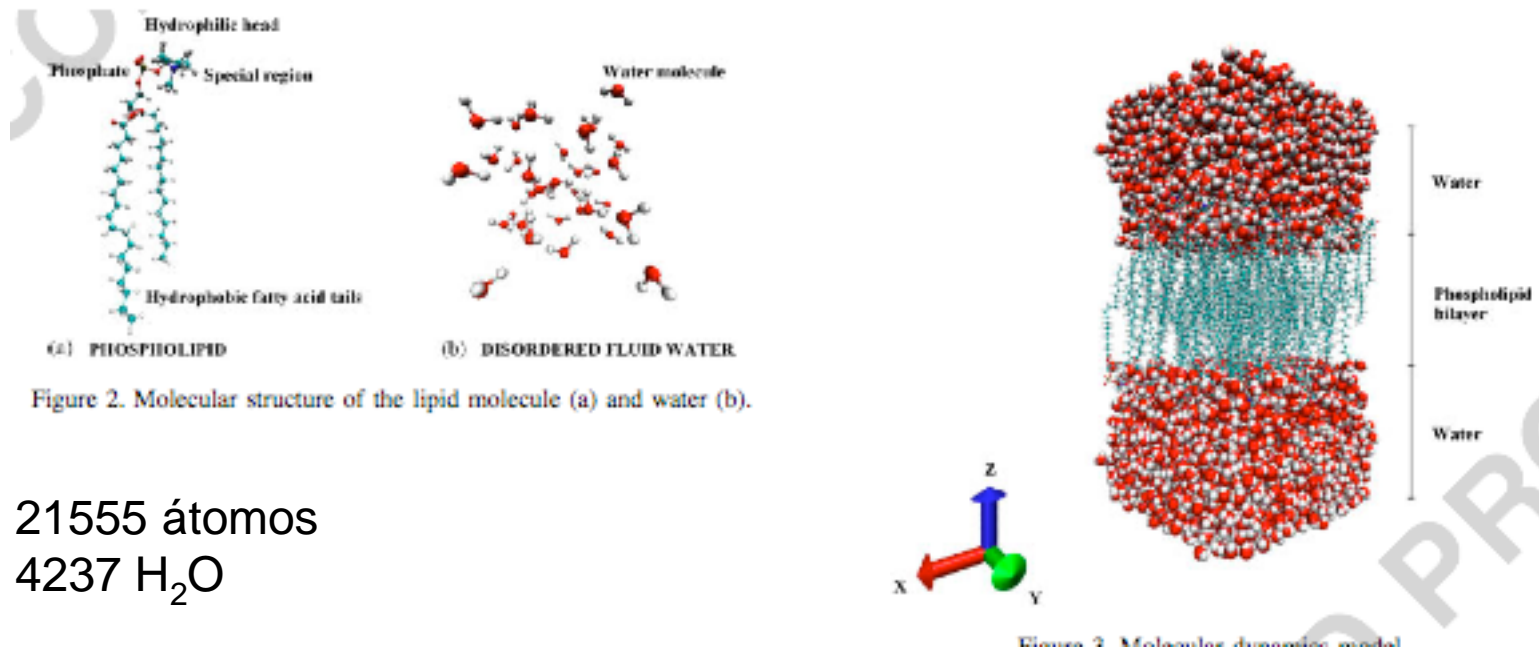
- La capa se comprime en el sentido de la fuerza aplicada y "rebota"
- Las moléculas de agua invaden el espacio hidrofóbico



- Koshiyama K. Structural Change in Lipids Bilayers and water penetration induced by shock waves : Molecular Dynamics Simulations. Biophysical Journal Volume 91 September 2006 2198 – 2205.

Molecular dynamics study of the interaction of a shock wave with a biological membrane

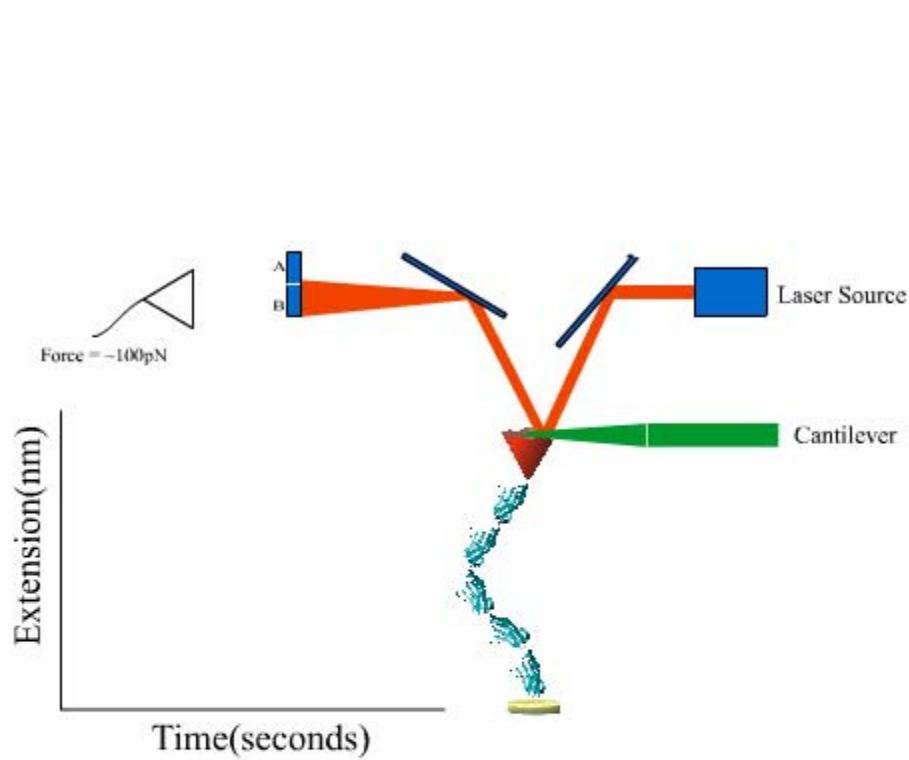
Javier Lechuga¹, Dimitris Drikakis^{1,*†} and Sandip Pal²



Ejemplos

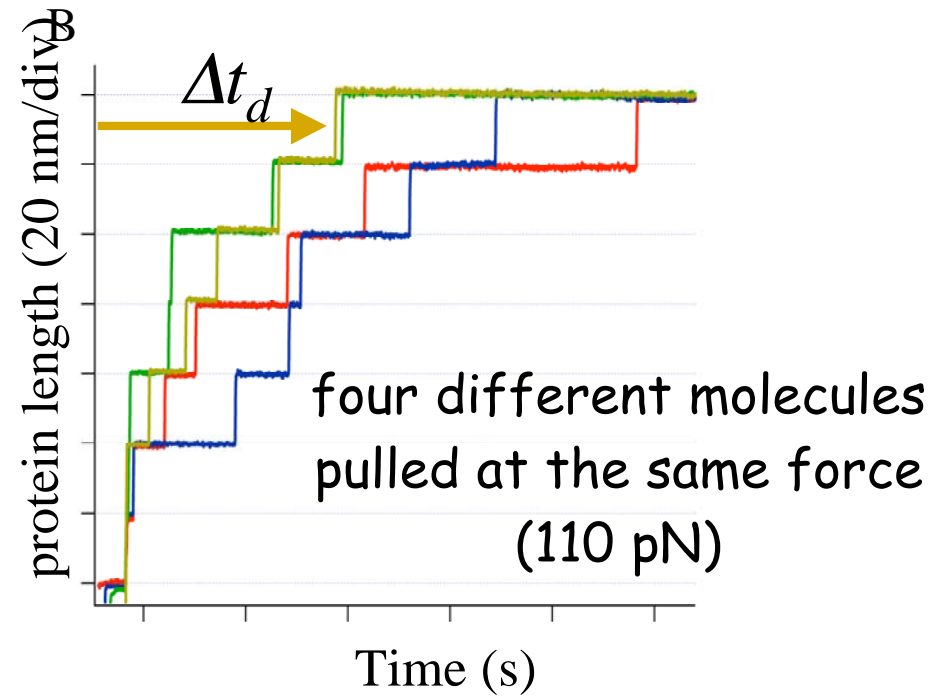
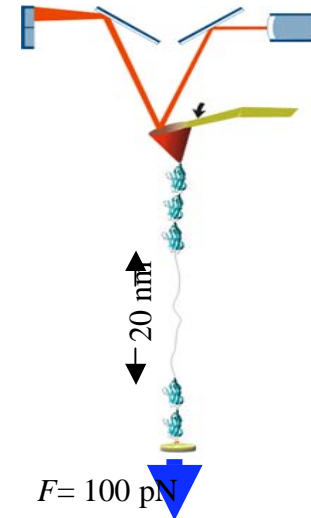
- Propiedades mecánicas de la proteína colágeno
- Transporte a través de una membrana celular
- Cambio estructurales en la membrana lipídica y penetración de agua bajo una onda de choque.

Técnicas experimentales: AFM

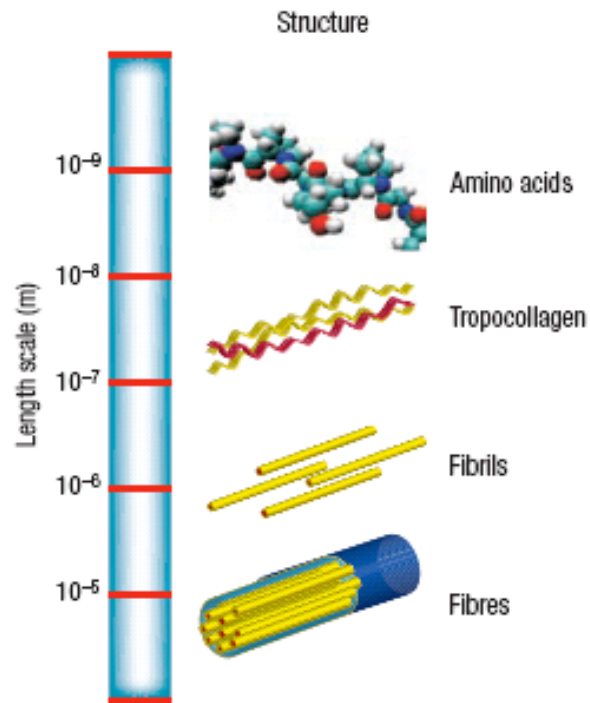


PLAY

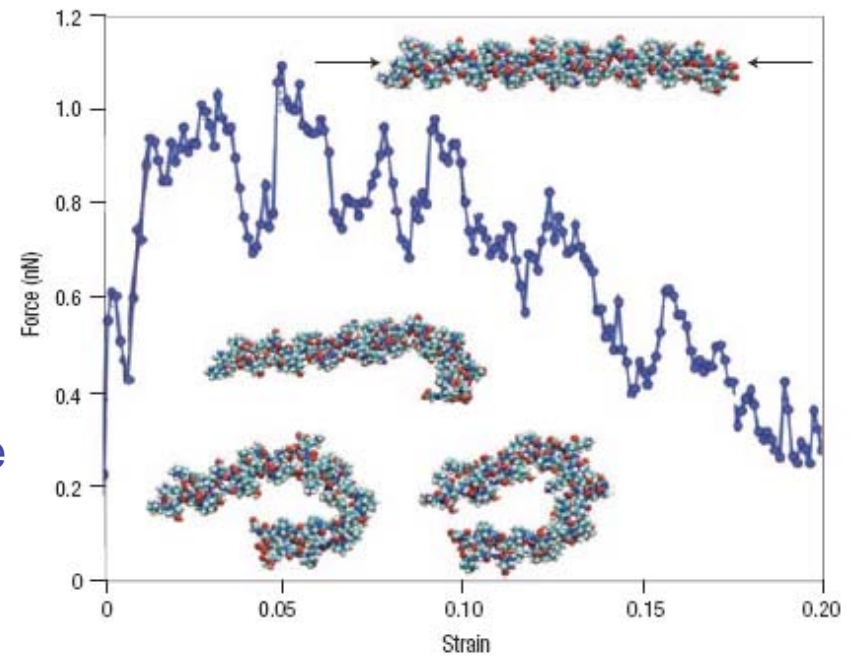
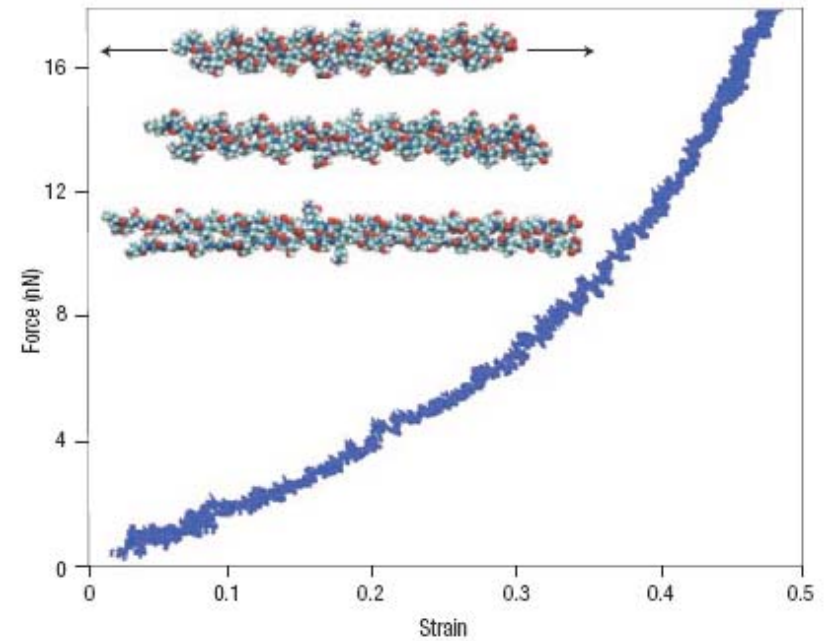
Created By Rohan Jos
Property of Fernandez



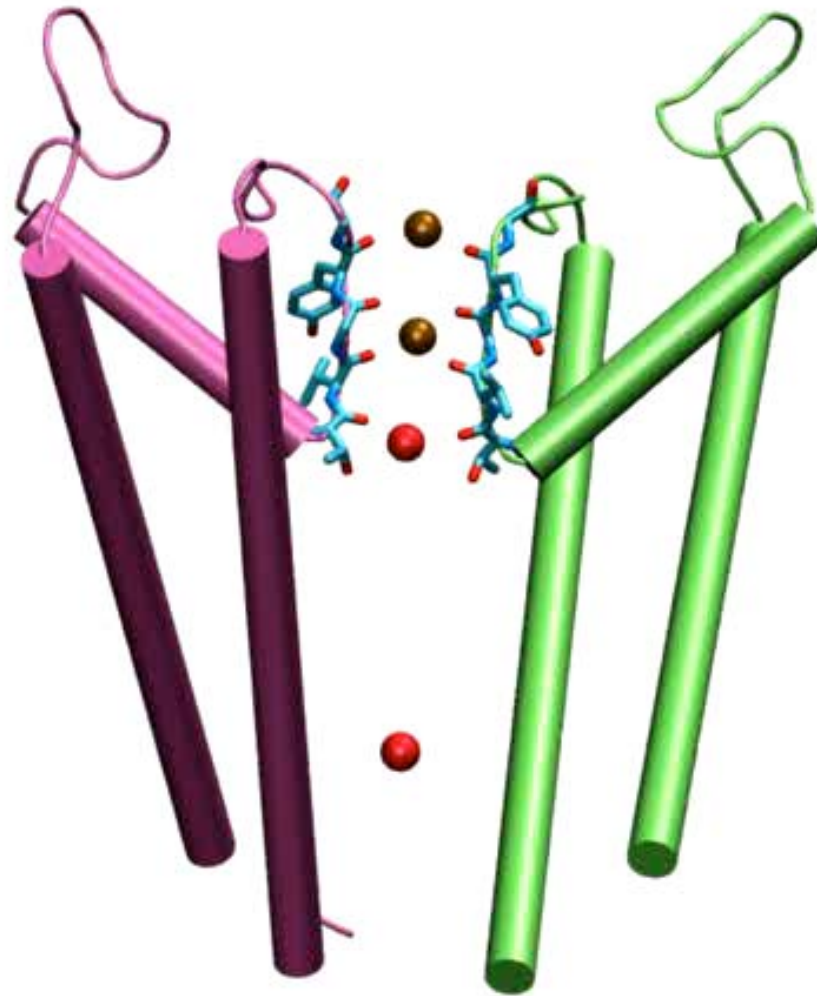
Biomecánica del colágeno



Simulación multiescala de una molécula de tropocolágeno bajo estiramiento y bajo compresión



Transporte a través de membranas, vía el canal K^+



Grupo
K. Shulten
Illinois

Idea del curso

1. Aclarar, desde un punto de vista físico, lo que son las ondas de choque.
2. Conocer el estado del arte de los avances teóricos
3. Revisar las principales técnicas experimentales y sus aplicaciones, en particular en medicina.
4. Revisar la simulación computacional como herramienta cada vez más útil el estudio de ondas de choque.
5. Elaborar líneas de investigación interdisciplinaria.