

6 Resultados

Os resultados apresentados a seguir consistem no estudo da dinâmica de íons dentro de um único canal unidimensional. Estudou-se o comportamento dos íons fazendo comparação com alguns parâmetros físicos tais como: tempo, comprimento, probabilidade de transição e potencial elétrico que corresponde a força eletromotriz resultante do gradiente eletroquímico através da membrana (comparado ao potencial elétrico de equilíbrio do íon específico). Os resultados alcançados nesta dissertação partiram do estudo de estruturas de canais iônicos, utilizando a dinâmica da caminhada aleatória.

A Fig.(6.1) mostra que a distribuição de íons em um canal iônico, sem atuação de um potencial elétrico, tem um comportamento gaussiano com seu pico centrado em $x = 0$.

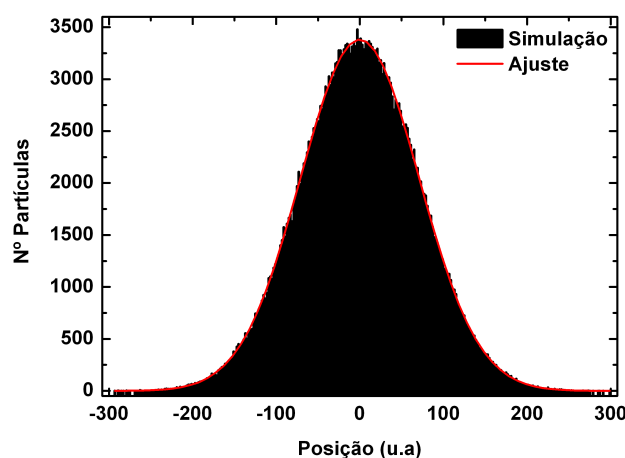


Figura 6.1: Simulação de um canal iônico com $L = 600$ (u.a), $T = 5000$ (u.a) e N° de Partículas = 300000. Os íons tem probabilidade igual de se moverem para direita ou para a esquerda. O comportamento do canal é uma distribuição de Gauss.

No programa de difusão foi colocada uma barreira para que, quando os íons a atingisse os refletissem para dentro do canal Fig.(6.2). Assim, mesmo com os íons começando a se movimentar em $x = 0$, localizado na extremidade do canal, o comportamento da distribuição de íons dentro do canal permaneceu gaussiano. Foi colocado o número de partículas em escala

logarítmica e realizado um ajuste quadrático. O expoente de x , referente à equação de Gauss foi $\alpha = 2.005$, ou seja, muito próximo de 2, representado pela curva em vermelho.

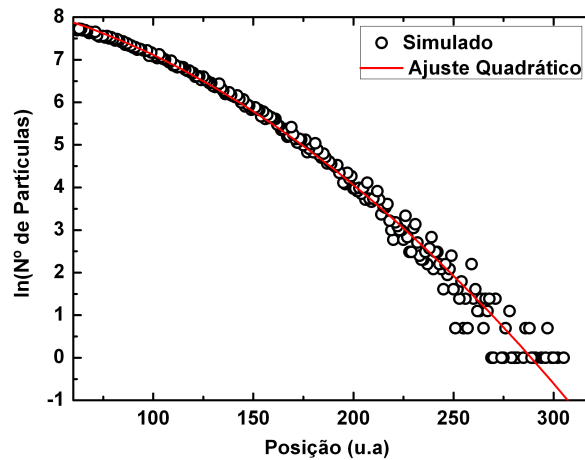


Figura 6.2: A simulação de um canal iônico com $L = 600$ (u.a), $T = 5000$ (u.a) e N° de Partículas = 300000, mostra o comportamento de uma distribuição de Gauss. Os íons partem da posição $x = 0$.

Na Fig.(6.3) a posição e o número de partículas foram colocados em uma escala logarítmica, observou-se um comportamento linear, com coeficiente angular de $\alpha = 2,006$. O resultado do coeficiente angular está próximo de 2 o que era esperado, pois este gráfico representa um canal iônico sem potencial aplicado. Deste modo, a distribuição dos íons no canal é próxima de uma gaussiana.

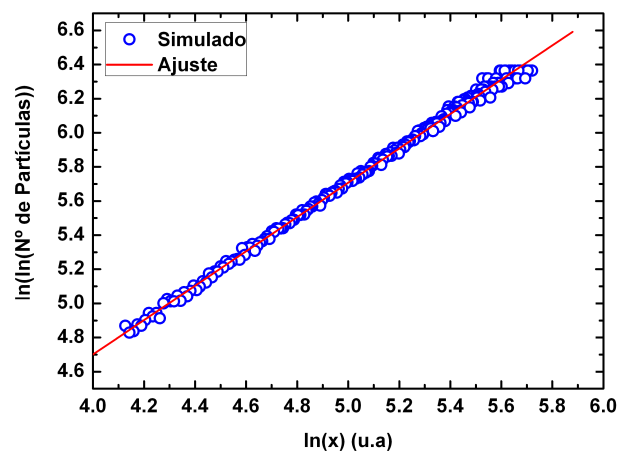


Figura 6.3: Simulação de um canal iônico com $L = 600$ (u.a), $T = 5000$ (u.a) e N° de Partículas = 300000. Comportamento linear, canal iônico sem a presença do potencial.

A Fig.(6.4) mostra a simulação de um canal iônico com diferentes potenciais aplicados. Inicialmente não há potencial aplicado no sistema após algum tempo aplicamos diferentes potenciais. O que se observa é que com a aplicação do potencial $V = 0.01$ (*u.a*) o comportamento gaussiano se mantém. A partir do potencial $V = 0.02$ (*u.a*) esse comportamento começa a se desfazer.

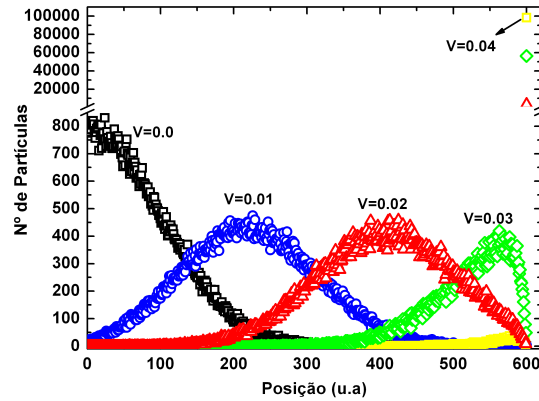


Figura 6.4: Simulação de um canal iônico com $L = 600$ (*u.a*), $T = 10000$ (*u.a*) e N° de Partículas = 100000. As partículas estão acumulando nas extremidades inicial fonte (*F*) ou no final sorvedouro (*S*). A simulação foi realizada com diferentes probabilidades (correspondentes aos potenciais elétricos) e com número de partículas, comprimento e tempo fixo.

A Fig.(6.5) mostra que o tempo total para que todas partículas cheguem no final do canal é diretamente proporcional ao número de íons, demonstrando então, que o fluxo de íons é constante no tempo. O ajuste linear utilizado resultou em um coeficiente angular de $\alpha = 1,6 \times 10^5$ linha em azul. O critério de parada do programa está ligado ao número de íons que chegam no final do canal.

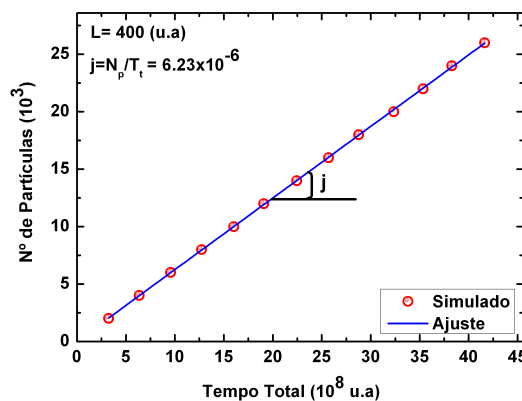


Figura 6.5: Tempo total para que todas as partículas cheguem ao final do canal em função do número de partículas para um canal iônico com $L = 400$ (*u.a*).

A Fig.(6.6) mostra o potencial versus o tempo médio para que os íons cheguem ao final do canal. O programa converge quando todos os íons que estão na fonte (início do canal) chegam ao sorvedouro (final do canal). Representando a alteração correspondente ao potencial de membrana. Assim, observa-se que quanto maior o potencial aplicado menor é o tempo médio para que os íons alcancem o final do canal.

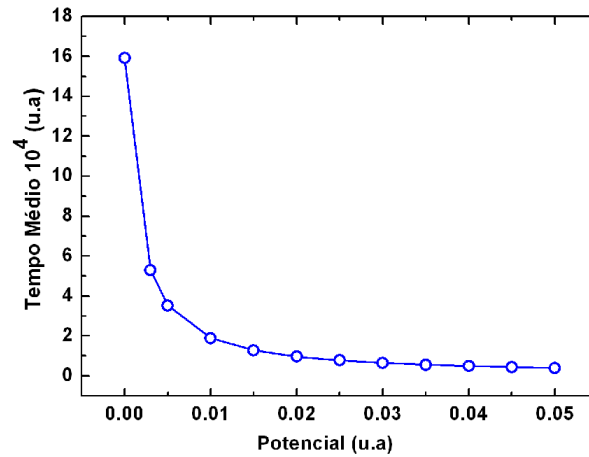


Figura 6.6: Simulação de um canal iônico com $L = 400$ (u.a), $T = 1,6 \times 10^5$ (u.a) e N° de Partículas = 100000.

A Fig.(6.7) mostra a distribuição dos íons dentro do canal. Os íons se movimentam na presença de um potencial fixo $V = 0.05$ (u.a), comprimento de $L = 600$ (u.a) e tempo variando. A distribuição tipicamente gaussiana se mantém até $T = 3000$ (u.a) após esse tempo o comportamento gaussiano se desfaz.

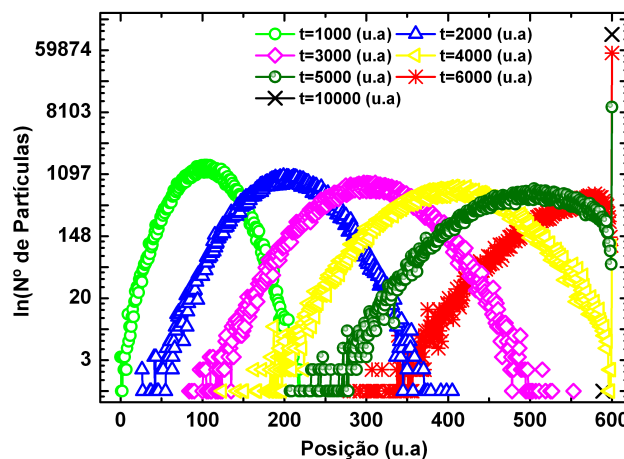


Figura 6.7: Simulação de um canal iônico com $L = 600$ (u.a) e N° de Partículas = 100000 e tempo variando de $T = 1000$ (u.a) até $T = 10000$ (u.a).

A Fig.(6.8) mostra a quantidade de íons que atinge a extremidade do canal em função do comprimento. Quanto menor o comprimento do canal maior é o número de íons que chegam no sorvedouro (final do canal) em um mesmo intervalo de tempo.

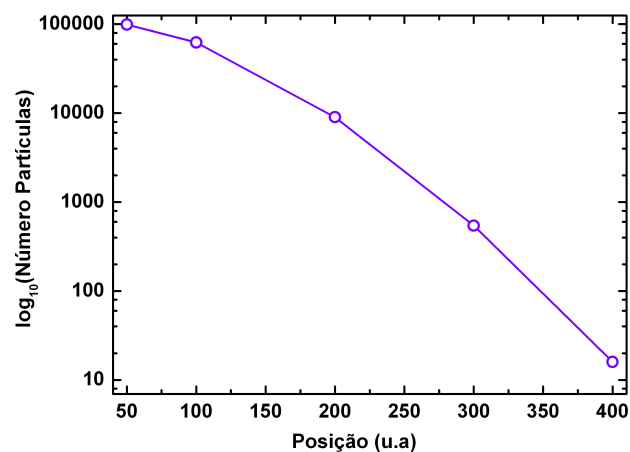


Figura 6.8: Simulação de um canal iônico com tamanho do canal variando de $L = 50$ (u.a) a $L = 400$ (u.a) e N° de Partículas = 100000.

6.1

Estudo dos Resultados do Canal de Sódio e Potássio

No presente trabalho, simulamos o Canal de Sódio e de Potássio, considerando a massa atômica dos referentes elementos químicos. Não foram levados em consideração a dinâmica de ativação e inativação dos canais, assim como, a estrutura celular. Ao considerar a massa atômica dos elementos químicos supracitados observamos que a dinâmica dos Canais de Sódio e de Potássio se diferenciavam, pois como a massa do Potássio é maior que a massa do Sódio, o Potássio se movimenta com uma velocidade menor que a do Sódio, resultando assim, em um tempo maior para que os íons de Potássio cheguem no final do canal.

Para explicarmos com maior clareza um dos fatores que alteram a velocidade dos íons de Sódio e de Potássio, vamos calcular a aceleração que cada íon sofre no canal, para tanto, utilizamos as ferramentas matemáticas descritas a seguir. Sabemos que uma carga que está em um canal elétrico sofre uma força.

Assim, a força que atua sobre o íon é dada por,

$$\vec{F} = q\vec{E} \quad (6-1)$$

onde q é a carga elétrica e \vec{E} é o campo elétrico. A relação entre o campo elétrico e o potencial elétrico de um capacitor é dada da seguinte forma,

$$|\vec{E}| = \frac{V}{d} \quad (6-2)$$

onde V é o potencial elétrico e d é a distância.

Então, fazendo a relação entre a força elétrica Eq.(6-1) e o potencial elétrico Eq.(6-2) temos que,

$$F = q \frac{V}{d} \quad (6-3)$$

Da segunda lei de Newton temos,

$$\vec{F} = \frac{d\vec{p}}{dt} = m\vec{a} \quad (6-4)$$

onde \vec{F} é a força aplicada em um determinado corpo, \vec{p} é o momento linear do íon, m é a sua massa e \vec{a} é a aceleração sofrida por esse corpo. Igualando as Eqs.(6-3) e (6-4) temos, em módulo, a seguinte relação,

$$V = m |\vec{a}| \frac{d}{q} \quad (6-5)$$

Logo, a aceleração é dada por,

$$|\vec{a}| = \frac{Vq}{md} \quad (6-6)$$

Isto implica que a aceleração dos íons dentro do canal só depende de suas massas pois, V , q , d são constantes.

Assim, temos que a aceleração do Sódio e do Potássio são dadas por,

$$a_{Na} = \frac{V_{Na}q}{m_{Na}d} \quad (6-7)$$

$$a_K = \frac{V_Kq}{m_Kd} \quad (6-8)$$

Supondo que os íons estão em um movimento uniformemente variado temos que,

$$v_f^2 - v_i^2 = 2a\lambda \quad (6-9)$$

onde λ é o livre caminho médio. Em $t = 0$ temos que a velocidade do íon no canal é $v_i = 0$.

Encontrando assim a velocidade final dos íons em um livre caminho médio,

$$v_f = \sqrt{2a\lambda} \quad (6-10)$$

Sustituindo a Eq.(6-6) referente a aceleração dos íons obtemos a velocidade final do íon da seguinte maneira,

$$v_f = \left(\frac{2qV\lambda}{md} \right)^{1/2} \quad (6-11)$$

Encontramos então,

$$\delta \propto \left(\frac{V}{m} \right)^{1/2} \quad (6-12)$$

onde δ é o incremento da probabilidade de deslocamento do íon, V é o potencial aplicado ao sistema e m é a massa do íon.

Então, conhecendo a velocidade Eq.(6-11) e o δ Eq.(6-12) obtemos a

seguinte relação,

$$v_f \propto \delta \tag{6-13}$$

A dinâmica utilizada para obter os resultados que veremos nos próximos capítulos depende do incremento da probabilidade de deslocamento, ou seja, da taxa de transição dos íons se movimentarem de um sítio para outro. A dinâmica está representada na Fig.(6.9).

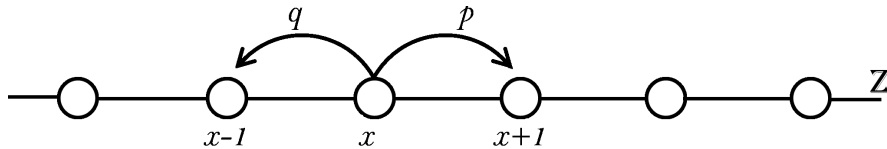


Figura 6.9: Esquema da caminhada aleatória simples.

A partir das probabilidades de transição podemos descrever a equação da distância líquida percorrida pelo íon onde p é a probabilidade do íon caminhar para a direita, q é a probabilidade do íon caminhar para a esquerda e l comprimento entre os passos.

$$p = \frac{1}{2} + \delta \tag{6-14}$$

$$q = \frac{1}{2} - \delta \tag{6-15}$$

onde $\delta \in [0, \frac{1}{2}]$.

Então, substituindo as Eqs.(6-14) e (6-15) na Eq.(6-16) encontramos a distância líquida percorrida que é a Eq.(6-17),

$$\bar{x} = (p - q)l \tag{6-16}$$

$$\bar{x} = 2\delta l \tag{6-17}$$

A velocidade média pode ser escrita como,

$$\bar{v} = \frac{\bar{x}}{\Delta t} \tag{6-18}$$

considerando $\Delta t \rightarrow \tau$ e $l = 1$ e substituindo a Eq.(6-17) na Eq.(6-18) obtemos

a velocidade média dos íons no canal.

$$\bar{v} = \frac{2\delta}{\tau} \quad (6-19)$$

$$\bar{v} \propto \delta \quad (6-20)$$

sabendo que $\delta \propto \left(\frac{V}{m}\right)^{1/2}$ ficamos com,

$$\bar{v} \propto \left(\frac{V}{m}\right)^{1/2} \quad (6-21)$$

Deste modo, as Eqs.(6-12) e (6-21) demonstram que um dos fatores que influenciam as velocidades dos íons nos canais é a sua massa.

6.2

Simulação do Canal Iônico de Sódio e Potássio com $V=0.1$ (u.a)

O comportamento dos Canais de Sódio e de Potássio foram simulados para um potencial inicial de $V = 0.1$ (u.a).

As Figs.(6.10) e (6.11) mostram a corrente com a variação do tempo, onde a corrente é dada por $I = \Delta Q / \Delta t$ que é a variação dos íons no interior do Canal de Sódio e de Potássio respectivamente dividida pelo intervalo de tempo gasto para os íons alcançarem o final do canal. Essa corrente aumenta ou diminui proporcionalmente ao número de íons, em um intervalo de tempo Δt .

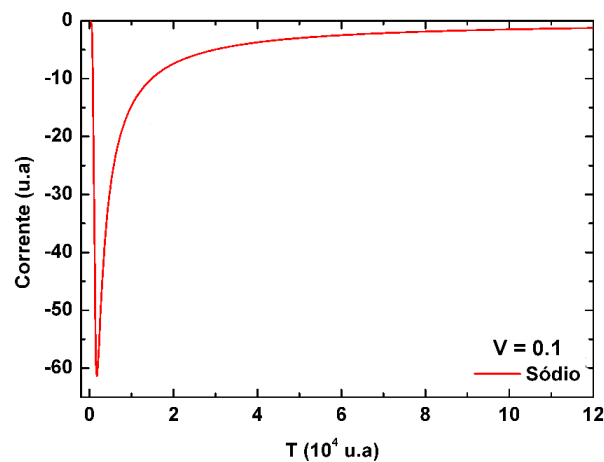


Figura 6.10: Corrente versus tempo do Sódio. Simulação de um Canal Iônico de Sódio com $V = 0.1$ (u.a), N° de Íons = 150000 (u.a), $T = 120000$ (u.a).

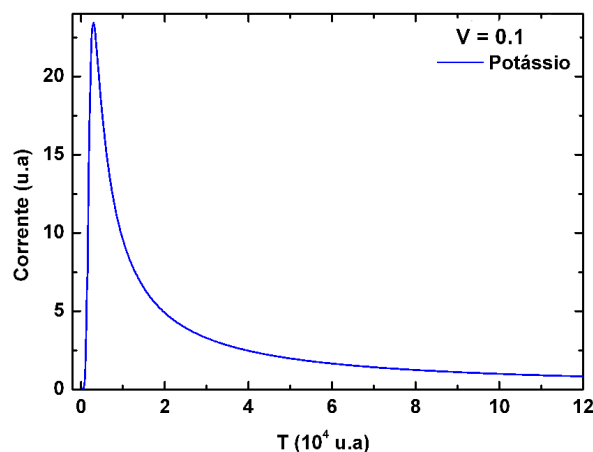


Figura 6.11: Corrente versus tempo do Potássio. Simulação de um Canal Iônico de Potássio com $V = 0.1$ (u.a), N° de Íons = 100000 (u.a), $T = 120000$ (u.a).

As Figs.(6.12) e (6.13) mostram a condutância do Sódio e do Potássio com a variação do tempo, onde a condutância é dada pela relação entre a corrente e o potencial, $g = I/V$.

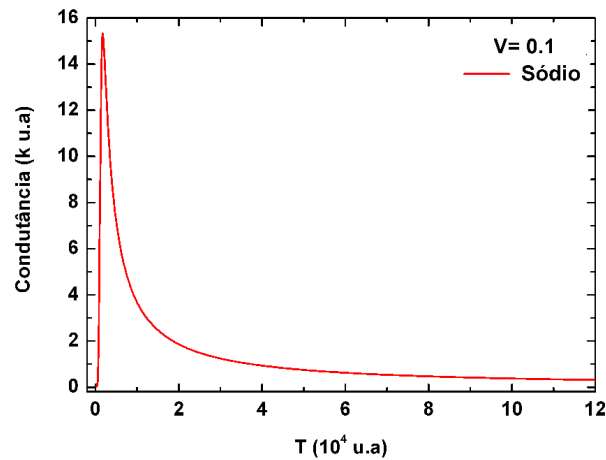


Figura 6.12: Condutância versus tempo do Sódio. Simulação de um canal iônico com $V = 0.1$ ($u.a.$); $T = 120000$ ($u.a.$) e a condutância que é a relação entre a corrente e o potencial $g = I/V$.

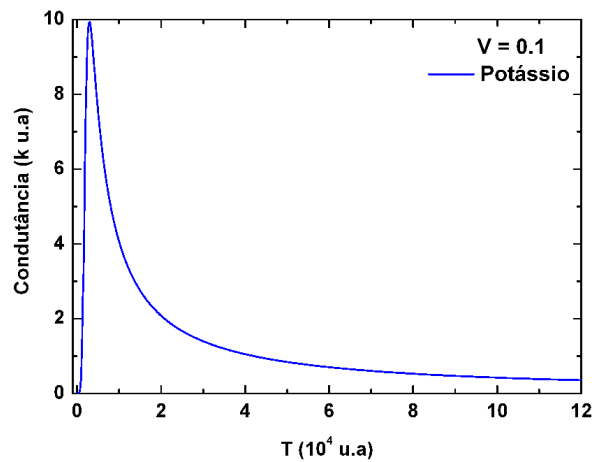


Figura 6.13: Condutância versus tempo do Potássio. Simulação de um canal iônico com $V = 0.1$ ($u.a.$); $T = 120000$ ($u.a.$) e a condutância que é a relação entre a corrente e o potencial $g = I/V$.

6.3

Simulação do Canal Iônico de Sódio e Potássio com $V=0.004$ (u.a)

O comportamento dos Canais de Sódio e de Potássio foram simulados para um potencial inicial de $V = 0.004$ (u.a).

As Figs.(6.14) e (6.15) mostram a corrente com a variação do tempo, onde a corrente é dada por $I = \Delta Q / \Delta t$ que é a variação dos íons no interior do Canal de Sódio e de Potássio respectivamente dividida pelo intervalo de tempo gasto para os íons alcançarem o final do canal. Essa corrente aumenta ou diminui proporcionalmente ao número de íons, em um intervalo de tempo Δt .

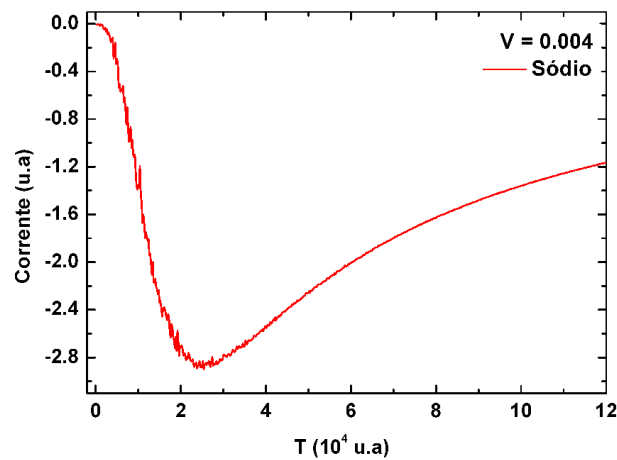


Figura 6.14: Corrente versus tempo do Sódio. Simulação de um Canal Iônico de Sódio com $V = 0.004$ (u.a), N° de Íons = 150000 (u.a), $T = 120000$ (u.a).

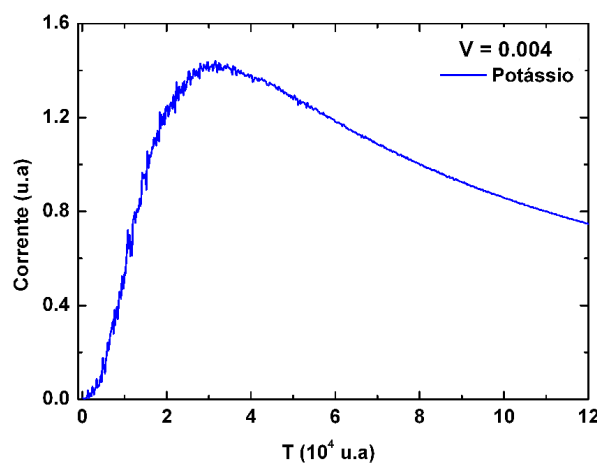


Figura 6.15: Corrente versus tempo do Sódio. Simulação de um Canal Iônico de Sódio com $V = 0.004$ (u.a), N° de Íons = 100000 (u.a), $T = 120000$ (u.a).

As Figs.(6.16) e (6.17) mostram a condutância do Sódio e do Potássio com a variação do tempo, onde a condutância é dada pela relação entre a corrente e o potencial, $g = I/V$.

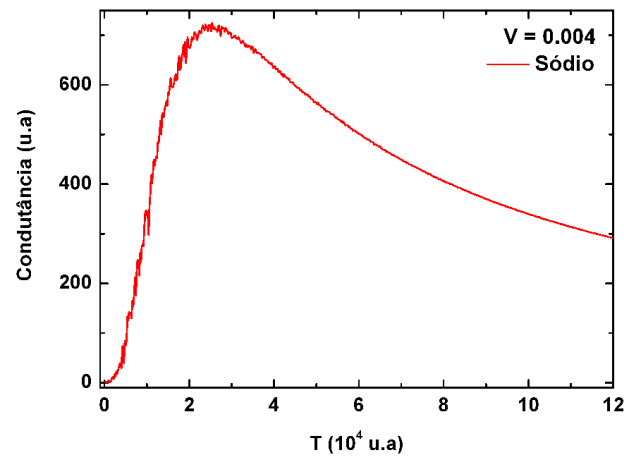


Figura 6.16: Condutância versus tempo do Sódio. Simulação de um canal iônico com $V = 0.004$ ($u.a$); $T = 120000$ ($u.a$) e a condutância que é a relação entre a corrente e o potencial $g = I/V$.

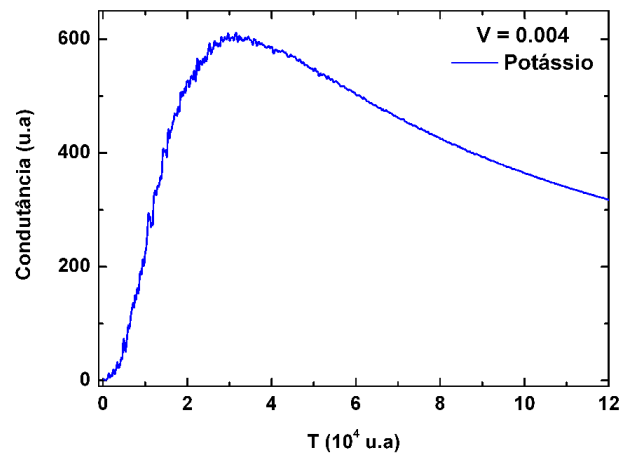


Figura 6.17: Condutância versus tempo do Potássio. Simulação de um canal iônico com $V = 0.004$ ($u.a$); $T = 120000$ ($u.a$) e a condutância que é a relação entre a corrente e o potencial $g = I/V$.

6.4

Comparação entre os Canais de Sódio e Potássio com $V=0.1$ (u.a)

Os resultados demonstrados na Fig.(6.18) indicam que a diferença no valor das massas dos íons de Sódio e Potássio influenciam na velocidade desses íons e por decorrência em suas acelerações.

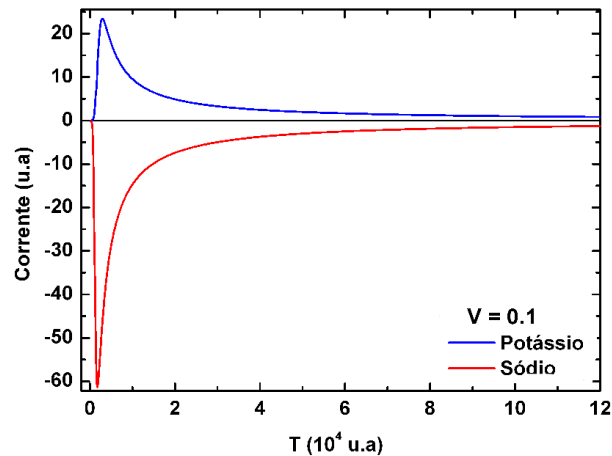


Figura 6.18: Corrente versus tempo do Sódio e do Potássio. Comparação das correntes dos canais de Sódio e Potássio com $V = 0.1$ (u.a); $T = 120000$ (u.a).

Os resultados demonstrados na Fig.(6.19) indicam que a diferença no valor das massas dos íons de Sódio e Potássio influenciam na determinação do comportamento temporal das curvas de condutância elétrica. A condutância no Canal de Sódio decai mais rapidamente do que no Canal de Potássio o que está de acordo com as Figs.(6.22) e (6.23).

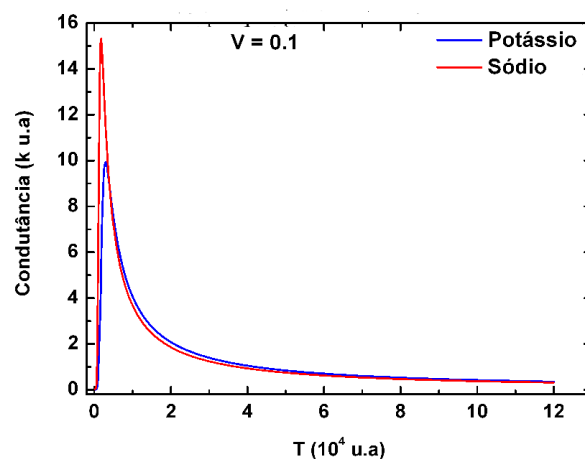


Figura 6.19: Condutância versus tempo do Sódio e do Potássio. Condutâncias dos canais de Sódio e Potássio com $V = 0.1$ (u.a); $T = 120000$ (u.a) e a condutância que é a relação entre a corrente e o potencial $g = I/V$.

6.5

Comparação entre os Canais de Sódio e Potássio com $V=0.004$ (u.a)

O comportamento dos canais para o potencial de $V=0.004$ (u.a) é muito semelhante ao do potencial $V=0.1$ (u.a) diferenciando-se no intervalo de tempo para saturar e obter o máximo da corrente.

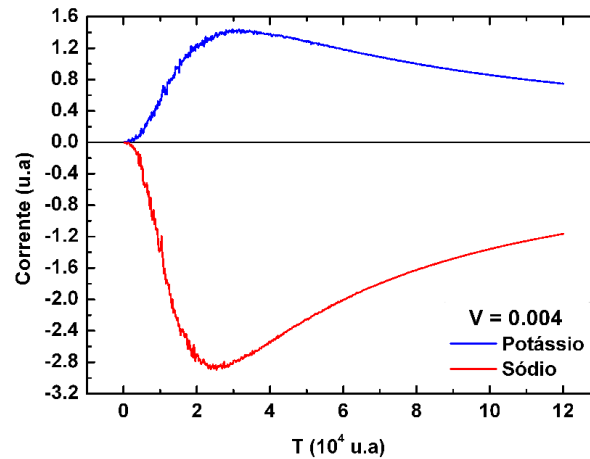


Figura 6.20: Corrente versus tempo do Sódio e do Potássio. Comparação das correntes dos canais de Sódio e Potássio com $V = 0.004$ (u.a); $T = 120000$ (u.a).

Os resultados demonstrados na Fig.(6.21) indicam que a diferença no valor das massas dos íons de Sódio e Potássio influenciam na determinação do comportamento temporal das curvas de condutância elétrica. A condutância no Canal de Sódio decai mais rapidamente do que no Canal de Potássio o que está de acordo com as Figs.(6.22) e (6.23).

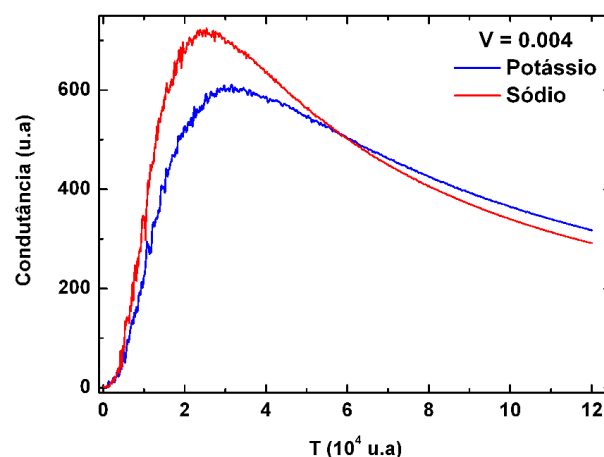


Figura 6.21: Condutância versus tempo do Sódio e do Potássio. Condutâncias dos canais de Sódio e Potássio com $V = 0.004$ (u.a); $T = 120000$ (u.a) e a condutância que é a relação entre a corrente e o potencial $g = I/V$.

As Figs. (6.22) e (6.23) referem-se a condutância do Sódio e do Potássio respectivamente com diferentes potenciais elétrico aplicados. Essas figuras são resultados experimentais encontrados na literatura.

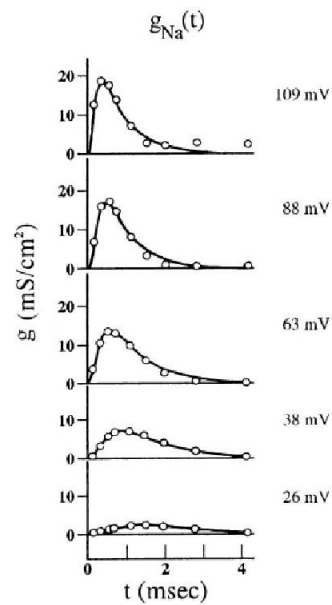


Figura 6.22: A figura mostra que para maiores valores do potencial elétrico a condutância do Sódio g_{Na} aumenta e depois decai rapidamente. Figura extraída da referência (adaptada de (Mal04)).

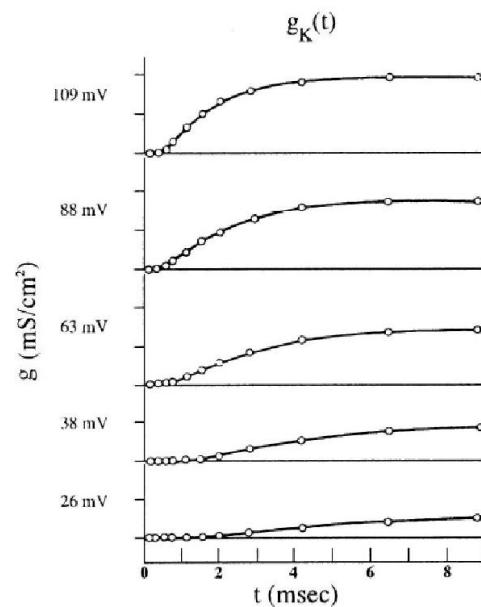


Figura 6.23: A figura mostra que ao aumentar o potencial elétrico a condutância do Potássio g_K decai lentamente. Figura extraída da referência (adaptada de (Mal04)).