

## 7

### Conclusões e Perspectivas

Neste trabalho foram utilizados conceitos da Mecânica Estatística, mais precisamente a dinâmica da caminhada aleatória, para simular o comportamento de canais iônicos presentes na membrana celular. Em particular, estudamos os Canais de Sódio e de Potássio, cujos comportamentos já são bem conhecidos experimentalmente e descrito na literatura. Parâmetros como: probabilidade de transição, tempo do movimento dos íons de um extremo ao outro, além da relação entre as massas atômicas do Sódio e do Potássio foram utilizados no programa computacional que simulou a caminhada aleatória dos íons no canal iônico. Essa maneira de simular os canais iônicos trouxe informações sobre a importância da massa atômica dos elementos químicos. Essas informações ajudaram a entender o comportamento dessas estruturas complexas, constituindo assim, uma nova ferramenta de trabalho. (Kee98).

Os resultados obtidos indicam um comportamento da posição iônica ao longo do canal caracterizado por uma distribuição de probabilidade. Este comportamento se manteve após a introdução, na simulação, de uma barreira para reflexão dos íons. Essa barreira foi colocada para que quando os íons a atingisse os refletissem para dentro do canal. 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. O comportamento gaussiano também se manteve após a aplicação do potencial elétrico que é comparado com a força eletromotriz resultante do gradiente eletroquímico através da membrana. O potencial elétrico corresponde ao parâmetro da probabilidade de transição.

A dinâmica dos Canais de Sódio e de Potássio, simulada via caminhada aleatória, foi efetuada considerando-se as massas atômicas dos íons de Sódio e Potássio Sec.(6.1). Os resultados mostraram que a maior massa do íon de Potássio resultou em um deslocamento menos acelerado que para o Sódio e conseqüentemente prolongamento do tempo do íon de Potássio para atingir o final do canal. Esta dinâmica dos íons de Sódio e de Potássio se manteve para diferentes potenciais aplicados.

Observou-se uma dependência linear entre o número total de íons e o

tempo total, onde uma unidade de tempo de simulação corresponde a quando todos os íons dão o primeiro passo, quando todos os íons dão o segundo passo é correspondente a duas unidades de tempo e assim sucessivamente. Por fim, foi mostrado que o tempo médio para que os íons cheguem no final do canal se reduz com o aumento do potencial elétrico aplicado, com o tempo médio sendo dado pela razão entre o tempo total que o íons levam para atravessarem o canal pelo número total de íons (Fer10).

Propomos aplicar os resultados obtidos nesta dissertação no estudo de outros canais iônicos, além de transformar os parâmetros aqui estudados como: probabilidade de transição, tempo de simulação, comprimento do canal iônico, distribuição de íons dentro do canal, potencial elétrico transmembranar, além da massa dos íons de Sódio e de Potássio em uma linguagem realista e assim, reproduzir o comportamento eletrofisiológico com maior fidelidade.