

284

SIMULAÇÃO DA ADESÃO CELULAR ATRAVÉS DE PONTES MOLECULARES. Ana C. R. Teixeira, Marco A. P. Idiart. (Instituto de Física – UFRGS)

A adesão entre estruturas biológicas geralmente se dá através de pontes formadas por moléculas reativas de distribuição discreta sobre superfícies opostas. Queremos criar um modelo estatístico simples que descreva a dinâmica populacional das ligações responsáveis pela aderência entre estruturas celulares independentes. Os fatores a serem considerados em nossa simulação são: (a) As propriedades cinéticas das moléculas aderentes; (b) O movimento lateral das pontes sobre as superfícies; (c) A geometria das superfícies e a função da tensão com a posição horizontal das ligações, devido à sua deformação vertical. Este modelo da adesão entre duas células, se realístico, juntamente com estudos em maiores escalas dos mecanismos intercelulares, nos permitirão uma melhor compreensão da dinâmica de organização de tecidos celulares. As simulações são realizadas usando o método de simulações estatísticas de Monte Carlo. Nosso modelo simula uma superfície semi-esférica de raio a distando em d de uma superfície plana. Consideramos uma distribuição contínua de cadeias moleculares ligantes sobre a superfície curva e admitimos que a disposição das moléculas receptoras sobre a superfície plana se dê sobre uma rede discreta. As considerações energéticas e estatísticas estão embutidas na movimentação lateral das pontes sobre as superfícies e na probabilidade de sua formação e de sua ruptura. O modelo de energia potencial de ligação de cada ponte molecular advém da lei de Hooke unidimensional. Implementando-se apenas a movimentação lateral, com as superfícies em repouso, observamos que à temperatura crescente, a dependência da probabilidade de movimentação torna-se mais independente da variação de energia potencial envolvida, e aleatória, se aproximando de 0.5. Observamos que, após o equilíbrio, o anel de ligações em torno do raio de energia potencial mínima torna-se mais difuso quanto maior a temperatura. Calculamos a dispersão das ligações em torno da posição de equilíbrio em função da temperatura do sistema. Ao implementarmos o fenômeno de ligação e ruptura das pontes, juntamente com o afastamento das superfícies, analisamos a tensão entre estas em função de sua separação, resultado que pode nos fornecer informações importantes sobre o comportamento coletivo das ligações. (CNPq - PIBIC/UFRGS).