

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
FFCLRP - DEPARTAMENTO DE FÍSICA E MATEMÁTICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA APLICADA À MEDICINA E
BIOLOGIA

*Dinâmica crítica de modelos de
spin, autômatos celulares e
polipeptídeos*

Everaldo Arashiro

Tese apresentada à Faculdade de Filosofia Ciências e
Letras de Ribeirão Preto da USP, como parte das
exigências para a obtenção do título de Doutor em
Ciências. Área: Física Aplicada à Medicina e Biologia.

RIBEIRÃO PRETO - SP
2005

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
FFCLRP - DEPARTAMENTO DE FÍSICA E MATEMÁTICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA APLICADA À MEDICINA E
BIOLOGIA

*Dinâmica crítica de modelos de
spin, autômatos celulares e
polipeptídeos*

Everaldo Arashiro

Tese apresentada à Faculdade de Filosofia Ciências e
Letras de Ribeirão Preto da USP, como parte das
exigências para a obtenção do título de Doutor em
Ciências.

Área de Concentração:

Física Aplicada à Medicina e Biologia

Orientador:

José Roberto Drugowich de Felício

RIBEIRÃO PRETO - SP
2005

*À minha mãe e ao meu avô pela
confiança em todos esses anos.*

Agradecimentos

Ao Prof. Dr. José Roberto Drugowich de Felício, sob cuja orientação iniciei a minha vida acadêmica ainda no milênio passado, quando ainda fazia a minha graduação no curso de química. Agradeço a dedicação, a paciência, experiência passada tornando possível a elaboração e conclusão desta tese e principalmente a amizade durante todo esse período.

À “tia” Cláudia, uma grande amiga que me ajudou muito desde o início da minha iniciação científica.

À “dona dos resíduos químicos” Tânia Lassali.

Às minhas “mães” de plantão, “tia” Marlene (Maria Eduarda, Maria Isabela), Andréa (Beatriz e Carlos Eduardo) e Eliana (Henrique).

À “enérgica” Inês.

Ao companheiro de sala Henrique e ao amigo Leandro.

Aos técnicos do Departamento de Física e Matemática que por inúmeras vezes aborreci.

Às secretárias do Departamento de Física e Matemática, e ao pessoal da Seção de Graduação e da Pós-Graduação da FFCLRP que me agüentaram durante anos.

Aos meus parentes de Campo Grande.

À FAPESP pelo apoio financeiro.

Os ousados começam,
mas só os determinados terminam.

George Bernard Shaw

Resumo

ARASHIRO, E. **Dinâmica crítica de modelos de spin, autômatos celulares e polipeptídeos**, 2005. 98 p. Tese (Doutorado) – Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto, Universidade de São Paulo, Ribeirão Preto, 2005.

Nesse trabalho, são investigadas as propriedades dinâmicas de modelos da mecânica estatística na criticalidade. Inicialmente, trabalhando com modelos de spin e utilizando os conceitos de persistência global e de dimensão anômala da magnetização inicial, mostramos que o modelo de Baxter-Wu não está na mesma classe de universalidade dos modelos de Potts com quatro estados e de Ising com interação de três spins em uma direção, todos bidimensionais.

Na segunda parte da tese, estudamos o fenômeno de crescimento da superfície gerada pela deposição segundo as regras que definem os autômatos celulares probabilísticos propostos por Grassberger (modelos A e B). Esses dois autômatos não pertencem à classe de universalidade de Domany-Kinzel e apresentam novos expoentes críticos, cuja origem se deve à conservação de paridade. Determinamos o expoente de crescimento β_w , válido em tempos curtos, assim como os outros expoentes críticos associados ao crescimento de superfície (α e z). Nossas estimativas se comparam bem com os resultados obtidos a partir de razões de inteiros propostas por Jensen para os expoentes β , ν_{\parallel} e ν_{\perp} .

Finalmente, investigamos a transição de fase entre o estado helicoidal e o estado desordenado (*random coil*) da polialanina e do fragmento peptídico PTH(1-34), que corresponde aos resíduos 1 a 34 da região aminoterminal do hormônio das paratireóides. Nosso cálculo, que leva em conta as interações entre todos os átomos da molécula, está baseado em uma abordagem de tempos curtos. Os resultados dessa análise indicam que a transição *helix-coil* das polialaninas e do PTH(1-34) é de segunda ordem e apontam para uma classe de universalidade para a transição *helix-coil* em homopolímeros e proteínas (partindo de um estado helicoidal).

Palavras-chave: Simulação Monte Carlo, dinâmica fora do equilíbrio, persistência global, modelo de crescimento, transição *helix-coil*.

Abstract

ARASHIRO, E. **Critical dynamics of spin models, cellular automata and polypeptides**, 2005. 98 p. Thesis (Doctoral) – Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto, Universidade de São Paulo, Ribeirão Preto, 2005.

In this work we investigated dynamic properties of statistical mechanical models at criticality. At first, using the concepts of global persistence and anomalous dimension of initial magnetization, we showed that the Baxter-Wu model does not belong to the same universality class as 4-state Potts model and Ising with multispin interaction in one direction.

In the sequence, we studied the roughening behavior generated by deposition governed by rules defined by probabilistic cellular automata proposed by Grassberger (A and B models). Those models are known do not belong to the Domany-Kinzel universality class. They are characterized by different exponents which are related to the parity conserving (PC). We estimated the growth exponent β_w , in short-time regimen, such as, other critical exponents associated to the surface growth (α and z). Our results are in good agreement with those expected for parity conserving universality class.

At last we studied the phase transition between the completely helical state and the random coil of the polyalanine, such as, for the 34-residue human parathyroid fragment PTH(1-34). Our short-time simulations of the helix-coil transition are based on a detailed all-atom representation of proteins. The results indicate that helix-coil transition in polyalanine and PTH(1-34) is a second-order phase transition and suggest a universality class to the helix-coil transition in homopolymer and (helical) proteins.

Keywords: Monte Carlo simulation, nonequilibrium dynamics, surface growth process, helix-coil transition.

Sumário

Resumo	i
<i>Abstract</i>	ii
Lista de figuras	vi
Lista de tabelas	xiii
Lista de siglas	xv
Capítulo 1:	
Introdução	01
Capítulo 2:	
Simulação em tempos curtos	
2.1 O método Monte Carlo	08
2.2 Dinâmica de tempos curtos	11

Capítulo 3:

Dinâmica crítica dos modelos de Baxter-Wu, Ising com interação de três spins e de Potts com 4 estados

3.1 Os modelos	19
3.2 Resultados	23
3.2.1 Determinação do expoente dinâmico θ_g	23
3.2.2 Determinação do expoente dinâmico z para os modelos de Potts com 4 estados e de Ising com interação de três spins ...	28
3.2.3 Determinação do expoente dinâmico θ para os modelos de Potts com 4 estados e de Ising com interação de três spins	32
3.2.4 Determinação da dimensão anômala x_D	35
3.3 Conclusões	36

Capítulo 4:

Crescimento de superfícies geradas por autômatos celulares de Grassberger

4.1 Autômatos celulares	37
4.2 Modelos A e B de Grassberger	44
4.3 Representação de interfaces	46
4.4 Resultados	52
4.5 Conclusões	60

Capítulo 5:

Dinâmica de tempos curtos em polipeptídeos

5.1 Polímeros e as proteínas	61
5.2 A estrutura das proteínas	68
5.3 Enovelamento de proteínas	73
5.4 Transição <i>helix-coil</i> em polipeptídeos	75
5.4.1 O modelo	77
5.4.2 Resultados	79
5.5 Conclusões	86

Capítulo 6:

Conclusões	87
-------------------------	----

Bibliografia	90
---------------------------	----

Gracias por visitar este Libro Electrónico

Puedes leer la versión completa de este libro electrónico en diferentes formatos:

- HTML(Gratis / Disponible a todos los usuarios)
- PDF / TXT(Disponible a miembros V.I.P. Los miembros con una membresía básica pueden acceder hasta 5 libros electrónicos en formato PDF/TXT durante el mes.)
- Epub y Mobipocket (Exclusivos para miembros V.I.P.)

Para descargar este libro completo, tan solo seleccione el formato deseado, abajo:

