ESTUDO DO CÂNCER NO CONTEXTO DA MECÂNICA QUÂNTICA

Ana Beatriz de Oliveira (PIBIC/FA), Antonio Sérgio Magalhães de Castro (Orientador), e-mail: asmcastro@uepg.br

Universidade Estadual de Ponta Grossa/Departamento de Física

Ciências Exatas e da Terra – Modelos Matemáticos da Física, Física-Matemática

Palavras-Chave: *Mutação genética, fenômenos quânticos, câncer.*

Resumo

A Mecânica Quântica, ao estudar partículas em escalas atômicas e subatômicas, fornece bases para investigar fenômenos quânticos ligados ao surgimento e progressão do câncer. No câncer colorretal, observa-se que eventos malignos são raros quando se utilizam parâmetros realistas, entretanto, simulações com parâmetros simulados revelam oscilações quânticas associadas ao tautomerismo.

Introdução

O câncer é uma doença decorrente de mutações genéticas permanentes no DNA, e podem ser influenciadas por fenômenos quânticos, como sugerido por Schrödinger em WHAT IS LIFE? (1944), associando saltos quânticos à origem de mutações. No câncer colorretal, estudos indicam que mutações adaptativas podem surgir por mecanismos como tautomerismo de bases e tunelamento de prótons (Wakhule, 2018). Essas alterações favorecem a progressão tumoral, diminuindo a eficácia de tratamentos, justificando a importância de investigar a relação entre a Mecânica Quântica e a Biologia.

Materiais e Métodos

A metodologia do projeto foi teórica, considerando pesquisas bibliográficas sobre tumores e fenômenos quânticos. Realizou-se análise computacional, empregando a linguagem Python, utilizando o QuTiP para a obtenção dos gráficos.

Resultados e Discussão

Investigou-se a dinâmica do câncer colorretal através de três genes principais: o oncogene KRAS e os supressores de tumor TP53 e APC aplicando fenômenos quânticos como o tunelamento, descoerência e superposição de forma similar à Godbeer *et al.* Foram analisadas computacionalmente 50.000 criptas colorretais sem e com fenômenos quânticos, conforme Figura 1. Mesmo em grandes populações de criptas, não se observa a evolução até malignidade com os parâmetros reais considerados, conforme o modelo estocástico de Paterson *et al*. É necessário aumentar o número de criptas, mas com alto custo computacional. Com base nisso, fez-se uma nova simulação que permitiu observar a probabilidade de tautomerismo ao longo do tempo, conforme a Figura 2, gerada com parâmetros simulados.

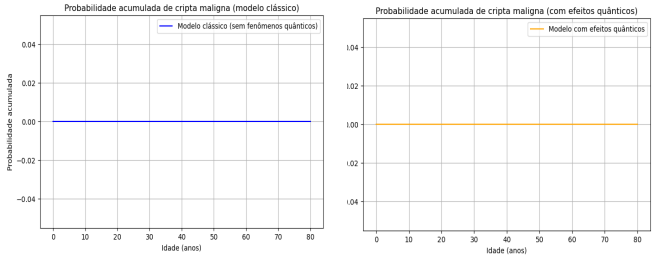


Figura 1. Análise de 50.000 criptas colorretais sem e com fenômenos quânticos com parâmetros reais.



Figura 2. Simulação da probabilidade de tautomerismo ao longo do tempo com parâmetros não realistas.

A base nitrogenada pode existir em superposição entre estados canônico e tautomerizado, com o tunelamento de prótons permitindo a transição entre eles. As interações com ambiente celular causam a perda de coerência quântica (descoerência), estabilizando o sistema em um estado definido, o que pode aumentar erros de pareamento durante a replicação do DNA (Godbeer *et al.* 2015; Slocombe *et al.* 2021).

Conclusão

Eventos malignos são raros e pequenas oscilações quânticas podem aumentar localmente erros de pareamento, afetando a dinâmica de mutações.

Agradecimentos

Agradecimentos a Fundação Araucária (FA) e à UEPG.

GODBEER, A. D.; AL-KHALILI, J. S.; STEVENSON, P. D. Modelling proton tunnelling in the adenine-thymine base pair. **Physical Chemistry Chemical Physics**, Cambridge, v.17, n. 19, p. 30285-30290, abr. 2015.

PATERSON, C.; CLEVERS, H.; BOZIC, I. Mathematical model of colorectal cancer initiation. **Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America (PNAS)**, Washington, v. 117, n. 34, p. 20681-20688, ago. 2020.

SCHRÖDINGER, E. **What is life? The physical aspect of the living cell.** Cambridge: Cambridge University Press, 1944.

SLOCOMBE, L.; AL-KHALILI, J. Quantum and classical effects in DNA point mutations: Watson-Crick tautomerism in A-T and G-C base pairs. **Physical Chemistry Chemical Physics**, Cambridge, v. 23, n. 7, p. 4081-4090, jan. 2021.

WAKHULE, A. A. Quantum mechanics and cancer biology. **ResearchGate**, [S.l.], jun.2018.