

# DESCRIÇÃO TEÓRICA DO COMPORTAMENTO MICROSCÓPICO DOS POLIMORFOS DE QUITINA E QUITOSANA E SUA INTERAÇÃO COM O CONTAMINANTE GLIFOSATO

\*Lourival R.de.S.Netto<sup>1</sup>, Renan F. Guerra<sup>2</sup>, Roberto R. Faria<sup>3</sup>, Eduardo de F. Franca<sup>4</sup>

1. Estudante de IC do Instituto de Química da Universidade Federal de Uberlândia - UFU; \*lorosone@hotmail.com

2. Mestrando do Programa de Pós Graduação em Química da Universidade Federal de Uberlândia – UFU;

3. Mestrando do Programa de Pós Graduação em Química da Universidade Federal de Uberlândia – UFU;

4. Pesquisador do Instituto de Química da Universidade Federal de Uberlândia – UFU, Uberlândia/MG

Palavras Chave: *Dinâmica Molecular, Polimorfos, Glifosato*

## Introdução

A quitina é um material orgânico muito abundante, sendo um dos principais componentes do exoesqueleto de artrópodes. Esse biopolímero possui os polimorfos  $\alpha$ - e  $\beta$ -. A quitosana é o principal derivado da quitina e é obtido pela desacetilação parcial ou total da mesma.

Tanto a quitina quanto a quitosana apresentam valor econômico devido principalmente à versatilidade de aplicação e suas atividades biológicas. A quitosana tem se mostrado um biomaterial promissor com destaque para a capacidade de interagir com contaminantes ambientais de diversas naturezas, em especial, os herbicidas<sup>1</sup> dentre os quais destaca-se o N-(fosfonometil)glicina, comercialmente chamado de Glifosato - o herbicida mais vendido mundialmente, em diversas formulações<sup>2</sup>.

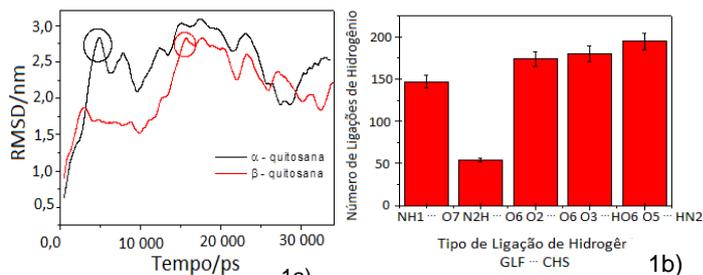
Apesar dos estudos já realizados, ainda não se conhece os detalhes estruturais das estruturas polimórficas em solução aquosa. Neste contexto, métodos de simulação computacional, como a Dinâmica Molecular (MD) permitem elucidar estruturalmente a conformação das cadeias polissacarídicas<sup>3</sup>. Este trabalho objetivou elucidar estruturalmente a conformação das cadeias polissacarídicas das formas polimórficas da quitina e das respectivas estruturas de quitosana em solução aquosa e; também, o processo de adsorção do herbicida glifosato por nanopartículas de quitosana utilizando métodos de Dinâmica Molecular.

## Resultados e Discussão

Foram realizadas simulações por dinâmica molecular de nanopartículas de:  $\alpha$ - e  $\beta$ -quitina e  $\alpha$ - e  $\beta$ -quitosana (Grau de acetilação. GA = 20% e pH = 6,5) compostas por 6 filamentos de quitina (CHT) e constituídas de 10 monômeros em conformação linear dispostos em uma matriz 3x2 inseridos numa caixa de simulação retangular a 1,5 nm do sistema. As fibras de quitosana (CHS) também foram simuladas na presença de moléculas do herbicida glifosato. Todas as simulações foram realizadas em solvente (SOL) explícito, SPC (Single Point Charge). O programa GROMACS 4.5.3 foi utilizado nas simulações com o campo de força GROMOS53a6. O tempo total de simulação foi de 40 e 35 ns para cada configuração do sistema de CHT e CHSL, respectivamente, e de 10 ns para a interação CHS-glifosato (GPJ).

**Tabela 1.** Parâmetros energéticos, estruturais e a raiz quadrada do desvio quadrático médio (RMSD) dos polimorfos de  $\alpha$  e  $\beta$ -CHT.

| Nano-partícula | Energia Total/<br>10 <sup>3</sup> kJ mol <sup>-1</sup> | Raio de Giro<br>(nm) | Difusão Lateral<br>(nm) | RMSD*<br>(nm) |
|----------------|--|----------------------|-------------------------|---------------|
| $\alpha$ -CHT  | - 308.0 ± 0.7  | 2.56 ± 0.57          | 15.9 ± 9                | 1.79 ± 0.9    |
| $\beta$ -CHT   | - 314.7 ± 1.2  | 2.77 ± 1.07          | 21.9 ± 16               | 1.91 ± 1.4    |



**Figura 1.** 1a) Evolução temporal da raiz quadrada do desvio quadrático médio (RMSD) dos átomos em relação a estrutura inicial. 1b) distribuição cumulativa do números de Ligações de Hidrogênio (L.H) ocorridas para cada grupo de átomos.

Os dados da Tabela 1 indicam que as diferenças estruturais entre os dois alótropos de CHT são significativas. Isto justifica-se pelo arranjo das cadeias de afetar a interação das fibras com as moléculas de SOL, especialmente através de L.H, influenciando o processo de inchamento e a estabilidade dos filamentos. Assim, o fato de  $\alpha$ -CHT ser mais estável no seu arranjo linear reflete apenas em um processo de inchaço; e para a  $\beta$ -CHT, uma perda total de sua estrutura inicial. As cadeias de CHS tornam-se solúveis em meio aquoso, porque elas perdem a sua linearidade e ordenamento, no entanto, observou-se que a solubilidade é mais rápida para a  $\alpha$ -CHS (Fig 1a) quando comparado com a  $\beta$ -CHS. Assim, sugere-se que a orientação das cadeias de CHS não afeta o estado final de agregação, mas afeta diretamente as cinéticas de solubilização destas nanopartículas de acordo com o tempo gasto na solubilização total. A interação CHS-GPJ via L.H (Figura 1b) ocorreram preferencialmente entre os grupos amino e hidroxila do GPJ com a CHS. O baixo GA das fibras simuladas é o principal responsável pela interação mais significativa dada à disponibilidade do par de elétrons livre do grupo amino das fibras de CHS.

## Conclusões

As simulações por MD permitiram a descrição e análise do comportamento microscópico das estruturas em solução aquosa e comprovam que há interação efetiva entre CHS e GPJ confirmando o potencial da nanopartícula como bioadsorvente.

## Agradecimentos

CNPq (PIBIC-IC-2013-EXA016), FAPEMIG.

<sup>1</sup> ELWAKEEL, J. *Disp. Science Tech.* v. 31 (3), p. 273-288, 2010.

<sup>2</sup> HU; ZHAO; SOROHAN. *Desalination*, v. 271, p. 150-156, 2011.

<sup>3</sup> MAZEAU; RINAUDO, *Food Hydrocolloids*, v. 18 (6), p. 885, 2004.