



## Impactos da Bioacumulação dos Nanoplásticos: Análise das Interações com Membranas Lipídicas Aplicando Simulações de Dinâmica Molecular *all-atom*

Raíssa Rossoni Rodrigues<sup>1\*</sup> (IC), Camila Steffani Caovilla<sup>1</sup> (IC), Tiago Espinosa de Oliveira<sup>1</sup> (PQ).

\*[raissa.rodriques@ufcspa.edu.br](mailto:raissa.rodriques@ufcspa.edu.br)

<sup>1</sup> UFCSPA, Av. Sarmiento Leite, 245 – Porto Alegre – Rio Grande do Sul

Palavras Chave: *Dinâmica Molecular, Poliestireno, Nanoplásticos, Membranas, Toxicidade celular.*

### Introdução

Os plásticos possuem grande resistência à degradação biológica. Milhões de toneladas são produzidas por ano e apresentam risco a saúde humana devido a possibilidade de bioacumulação. O poliestireno (PS) é um dos polímeros mais comuns presentes em detritos plásticos e ao ser exposto à radiação e a outros fatores ambientais pode se fragmentar em pequenas estruturas, dando origem a estruturas denominadas nanoplásticos (NP). Os NP possuem a capacidade de atravessar membranas celulares, podendo causar grande toxicidade em organismos presentes no ecossistema marinho.<sup>1</sup> Com isso, destaca-se a importância de uma melhor compreensão dos efeitos dessas estruturas nos organismos biológicos.

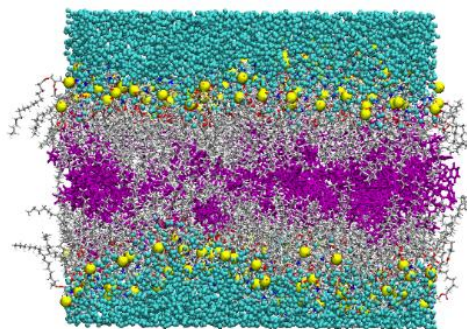
De um ponto de vista microscópico, as interações dos NP com as membranas desempenham um papel importante a ser desvendado. Nesse contexto, as simulações de dinâmica molecular (DM) *all-atom* podem ser consideradas uma ferramenta importante para auxiliar na compreensão desse problema. Os estudos de DM foram conduzidos utilizando o pacote GROMACS<sup>2</sup>. Os parâmetros usados nas simulações *all-atom* para os lipídios e os oligômeros de PS foram do campo de forças CHARMM36<sup>3</sup>. Os sistemas: (a) membrana de dipalmitoilfosfatidilcolina (DPPC) e (b) DPPC + PS, foram submetidos a temperatura de 333 K, a fim de investigar o comportamento dessas estruturas na fase fluida.

### Resultados e discussão

O projeto busca compreender a perturbação que o NP causa e como esse polímero pode modificar a composição lipídica das membranas, aplicando simulações de membranas de DPPC sem e com PS.

**Tabela 1.** Comparação da membrana de DPPC sem e com PS

Sistema	$A_L$ (nm <sup>2</sup> )	Espessura (nm)	$D$ (cm <sup>2</sup> /s) (1e-5)
DPPC <sup>4</sup>	0,625	3,9	0,039
DPPC+PS	0,775	4,7	0,051



**Figura 1.** Snapshot da simulação de uma membrana de DPPC com 30% de PS.

### Conclusões

A partir dos resultados preliminares obtidos, conclui-se que a presença de 30% (mol/mol) de PS torna a membrana mais fluida, o que é evidenciado por um aumento na área por lipídio, na espessura da bicamada e seguida pelo incremento na mobilidade dos fosfolipídios (DPPC). Além disso, pela visualização da trajetória da simulação é possível verificar que ocorre uma incorporação dos oligômeros de PS na bicamada. Nossos resultados corroboram os resultados experimentais<sup>1</sup> que o comportamento fluido da membrana é afetado pela presença de NP.

### Agradecimentos

Os autores agradecem à UFCSPA, CAPES e FAPERGS pelo financiamento. Esse trabalho usou recursos do "Centro Nacional de Processamento de Alto Desempenho em São Paulo (CENAPAD-SP)."

### Referências e notas

- (1) MORANDI, M. I. et al. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 118, 4, 2021.
- (2) ABRAHAM, M. J. et al. *SoftwareX*, 1-2, 19-25, 2015.
- (3) JO, S. et. al. *J. Comput. Chem.*, 29, 1859-1865, 2008.
- (4) HOFŠÁB, C. et al. *Biophysical Journal*, 84, 2192, 2003.