

Simulação computacional da detecção de um herbicida por um nanobiossensor enzimático

Richard André Cunha* (PG)¹, Eduardo de Faria Franca. (PQ)¹, Fábio de Lima Leite (PQ)².

* richard4quimica@yahoo.com.br

¹ Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, Brasil.

² Universidade Federal de São Carlos, Sorocaba, SP, Brasil.

Palavras Chave: Nanobiossensor, Dinâmica Molecular, AFM, ACCase, Diclofop.

Introdução

Nanobiossensores são dispositivos de detecção geralmente compostos por um componente biológico, um transdutor de escala nanométrica e um detector. Ao se combinar um transdutor com resposta mecânica e uma enzima, têm-se uma nova classe de nanobiossensores, cuja resposta mecânica é resultado da interação específica entre uma enzima e seu inibidor. A partir deste pressuposto a imobilização da enzima acetil co-enzima A carboxilase (ACCase) na ponta de um microscópio de força atômica (AFM) resulta em um nanobiossensor capaz de detectar seu herbicida inibidor comercial denominado diclofop. O herbicida, ligado a um filme fino, interage com os sítios ativos expostos da ACCase que está adsorvida na ponta do cantilever do AFM. Este evento resulta numa variação na força de interação medida pelo AFM, que é utilizada como sinal analítico para a determinação qualitativa e quantitativa do herbicida. O adequado funcionamento do biossensor requer a escolha do meio que ele será utilizado. Dessa forma, esse trabalho visa elucidar o principal evento molecular que ocorre na detecção deste herbicida na presença e ausência de solvente.

Resultados e Discussão

Simulações por Dinâmica Molecular foram realizadas por 10ns utilizando a metodologia *Steered Molecular Dynamics (SMD)* visando mimetizar o processo responsável pela variação da força medida no AFM, como mostrado na **Figura 1**.

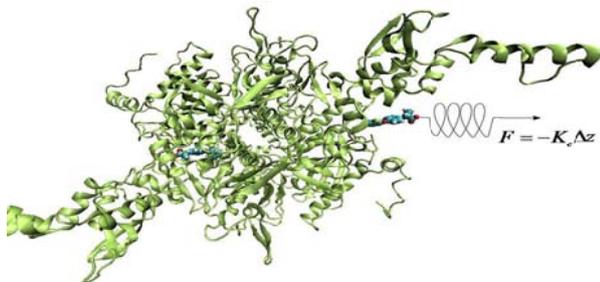


Figura 1. Extração do diclofop a velocidade constante de 0,001 nm/ps. $K_e = 610 \text{ N.m}^{-1}$.

Um dos sistemas foi simulado, no vácuo, no ensemble NVT (310K) e o outro em água 35ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

explícita (SPC), no ensemble NPT (1 bar e 310K). O campo de força OPLSAA do pacote de programas GROMACS 4.5.3 foi utilizado.

Análises da dinâmica estrutural revelaram que a enzima ACCase sofreu modificações estruturais significativas no vácuo sem haver perda da atividade enzimática. Isto justifica o papel da água na estabilização da estrutura da enzima. Entretanto, trabalhos anteriores¹ revelaram que a água desfavorece a energia ligação entre o diclofop e a ACCase em 12,4%. Neste trabalho, foi verificado que parte da resposta analítica se deve a presença de água, a qual resulta em uma força de interação média diclofop+ACCase aproximadamente duas vezes maior (1.563,7 pN) que essa interação no vácuo (726,9 pN), como mostrado na **Figura 2**.

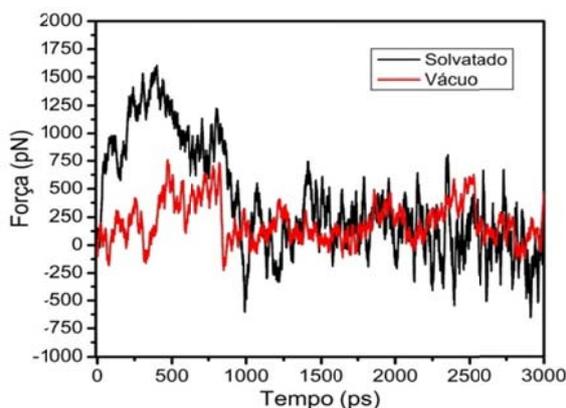


Figura 2. Curva de força dos processos de extração do herbicida diclofop do sítio ativo da ACCase.

Dessa forma, o solvente água pode ser considerado um interferente nas análises desse biossensor.

Conclusões

A utilização do nanobiossensor em solução aquosa superestima a o sinal analítico, diminuindo sua sensibilidade na detecção de herbicidas específicos.

Agradecimentos

CAPES, FAPEMIG e Rede Mineira de Química.

¹ Cunha, R. A.; Franca, E. F.; Leite, F. L. 24ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química, 2011., TEO-80.