

**XU** Congresso Fluminense de Iniciação Científica e Tecnológica

**28<sup>o</sup>**

Encontro de Iniciação Científica da UENF

**20<sup>o</sup>**

Círculo de Iniciação Científica do IFFluminense

**16<sup>a</sup>**

Jornada de Iniciação Científica da UFF



**U III** Congresso Fluminense de Pós-Graduação

**23<sup>a</sup>**

Mostra de Pós-Graduação da UENF

**8<sup>a</sup>**

Mostra de Pós-Graduação do IFFluminense

**8<sup>a</sup>**

Mostra de Pós-Graduação da UFF

## Análise Termodinâmica da Interação da Nicotina com Modelos de Membranas de Surfactante Pulmonar utilizando Ressonância Magnética Eletrônica

Fadi Simon de Souza Magalhães<sup>a</sup>, Ernanni Damião Vieira<sup>b</sup>, Antônio José da Costa-Filho<sup>c</sup>, Luís Guilherme Mansor Basso<sup>a</sup>

<sup>a</sup>Laboratório de Ciências Físicas, Centro de Ciência e Tecnologia, Universidade Estadual do Norte Fluminense Darcy Ribeiro, Campos dos Goytacazes, RJ, Brasil.

<sup>b</sup>Laboratório de Física Biológica, Instituto de Física, Universidade Federal de Goiás, GO, Brasil.

<sup>c</sup>Laboratório de Biofísica Molecular, Departamento de Física, Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto, Universidade de São Paulo, Ribeirão Preto, SP, Brasil.

As membranas de surfactante pulmonar são membranas lipídicas especializadas encontradas nos alvéolos dos pulmões e são essenciais para a função respiratória. Essas membranas contêm uma mistura de lipídios, proteínas e carboidratos e sua principal função é reduzir a tensão superficial na interface ar-líquido dentro dos alvéolos. Neste trabalho, usamos dois modelos de membrana de surfactante pulmonar compostos de fosfatidilcolina dipalmitoil (DPPC) pura ou uma mistura de DPPC, fosfatidilcolina palmitoil-oleoil (POPC) e fosfatidilglicerol palmitoil-oleoil (POPG) para estudar os efeitos da droga parassimpatomimética nicotina na coexistência de fases em dois modelos de membrana por ressonância magnética eletrônica (RME) e extensas simulações espectrais de mínimos quadrados não lineares (MQNL). Nossos resultados mostram que a nicotina causa apenas pequenas alterações na ordenação e dinâmica dos lipídios dos modelos de surfactante pulmonar DPPC e DPPC/POPC/POPG, mas amplia a região de coexistência de fases experimentada pelos modelos de membrana, estendendo a faixa de temperatura na qual a coexistência de fases ocorre. Para obter mais informações sobre as interações moleculares subjacentes, a teoria não linear de van't Hoff foi aplicada aos dados RME/MQNL e mostrou que a nicotina modifica as quantidades termodinâmicas que descrevem a coexistência de fases, incluindo as mudanças de entalpia e entropia dos perfis de capacidade térmica. A análise revelou que a nicotina modificou significativamente a dependência da temperatura da mudança de energia livre, o que alterou a força motriz termodinâmica e o equilíbrio de interações não covalentes dos lipídios em equilíbrio. Em geral, nossa análise termodinâmica RME/MQNL/van't Hoff destaca a importância de entender os efeitos de moléculas que interagem com membranas na separação de fases em membranas lipídicas, uma vez que esses efeitos podem ter implicações significativas para a função da membrana.

Instituição do Programa de IC, IT ou PG: UENF

Eixo temático: Biofísica Molecular

Fomento da bolsa (quando aplicável): CAPES

ORGANIZAÇÃO E REALIZAÇÃO:



APOIO:



**XU** Congresso Fluminense de Iniciação Científica e Tecnológica

**28<sup>o</sup>**

Encontro de Iniciação Científica da UENF

**20<sup>o</sup>**

Circuito de Iniciação Científica do IFFluminense

**16<sup>a</sup>**

Jornada de Iniciação Científica da UFF



**U III** Congresso Fluminense de Pós-Graduação

**23<sup>a</sup>**

Mostra de Pós-Graduação da UENF

**8<sup>a</sup>**

Mostra de Pós-Graduação do IFFluminense

**8<sup>a</sup>**

Mostra de Pós-Graduação da UFF

## Thermodynamic Analysis of Nicotine Interaction with Pulmonary Surfactant Model Membranes by Electron Spin Resonance

*Fadi Simon de Souza Magalhães<sup>a</sup>, Ernanni Damião Vieira<sup>b</sup>, Antônio José da Costa-Filho<sup>c</sup>, Luís Guilherme Mansor Basso<sup>a</sup>*

<sup>a</sup>Physical Sciences Laboratory, Center of Science and Technology, State University of Northern Rio de Janeiro, Campos dos Goytacazes, RJ, Brazil.

<sup>b</sup>Biological Physics Laboratory, Institute of Physics, Federal University of Goiás, GO, Brazil.

<sup>c</sup>Molecular Biophysics Laboratory, Department of Physics, Faculty of Philosophy, Sciences and Letters of Ribeirão Preto, University of São Paulo, Ribeirão Preto, SP, Brazil.

Pulmonary surfactant membranes are specialized lipid membranes found in the alveoli of the lungs and are essential for normal respiratory function. These membranes contain a mixture of lipids, proteins, and carbohydrates, and their main function is to reduce surface tension at the air-liquid interface within the alveoli. Here, we used two pulmonary surfactant membrane models comprised of pure dipalmitoyl phosphatidylcholine (DPPC) or a mixture of DPPC, palmitoyl-oleoyl phosphatidylcholine (POPC) and palmitoyl-oleoyl phosphatidylglycerol (POPG) to study the effects the parasympathomimetic drug nicotine in the two-phase coexistence of the model membranes by electron spin resonance (ESR) and extensive non-linear least-squares (NLLS) spectral simulations. Our results show that nicotine causes only slight changes to the ordering and dynamics of the lipids of both DPPC and DPPC/POPC/POPG pulmonary surfactant models, but widens the phase coexistence region experienced by membrane models, extending the temperature range in which the coexistence of phases occurs. To gain insight into the underlying molecular interactions, non-linear van't Hoff theory was applied to the ESR/NLLS data and showed that nicotine modifies the thermodynamic quantities describing the phase coexistence, including the enthalpy and entropy changes of the heat capacity profiles. The analysis revealed that nicotine significantly modified the temperature dependence of the free energy change, which altered the thermodynamical driving force and the balance of non-covalent interactions of the lipids in equilibrium. Overall, our thermodynamic ESR/NLLS/van't Hoff analysis highlights the importance of understanding the effects of membrane-interacting molecules on phase separation in lipid membranes since these effects can have significant implications for membrane function.

ORGANIZAÇÃO E REALIZAÇÃO:



APOIO:

