

**XXI CONGRESSO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UNIVERSIDADE FEDERAL DE CAMPINA
GRANDE**



**MODELAGEM DE PEPTÍDEOS MIMÉTICOS BIOINSPIRADOS EM LACASES FÚNGICAS
COM POTENCIAL PARA USO EM BIORREMEDIADAÇÃO**

Lilian Silva Santos¹, Bruno Medeiros Roldão de Araújo ²

RESUMO

A lacase é uma enzima multicobre oxidase que geralmente possui quatro átomos de cobre em sua estrutura, os quais são responsáveis pela oxidação do substrato. Devido a sua inespecificidade e grande potencial redox a lacase tem sido alvo de pesquisas para possível uso em processos de biorremediação. Ao longo dos anos, a poluição vem se tornando um problema cada vez maior, em parte, esse avanço se dá devido ao crescimento populacional aliado à rápida taxa de industrialização e ao mal tratamento dos resíduos sólidos urbanos (RSU). O lixivido é um efluente líquido e tóxico encontrado principalmente em lixões a céu aberto e aterros sanitários produzido a partir da decomposição de matéria orgânica. O objetivo principal deste trabalho foi avaliar, por meio de simulações in silico, a interação do modelo teórico da lacase fúngica de *Pleurotus ostreatus* com diferentes compostos poluentes presentes em lixiviados de aterros sanitários. Dez foram escolhidos arbitrariamente, incluindo acetato de metoxietila, 2-metil-4,6-dinitrofenol, ácido quinolina-2-carboxílico, 3,5-dinitrociclohexan-1-ona, entre outros. Os resultados das simulações indicaram que a lacase apresenta alta afinidade por vários dos compostos testados, com valores de energia livre de Gibbs variando de -8,3 kcal/mol a -6,0 kcal/mol. O composto 3-metil-1,2-di-hidrobenzo[j]aceantrylen-1-ol apresentou a maior afinidade (-8,3 kcal/mol) seguido pelo ácido quinolina-2-carboxílico (-6,2 kcal/mol) e o 9,9-dimetil-10H-acridina (-6,5 kcal/mol). Esses compostos formaram interações estáveis com resíduos de aminoácidos presentes nos sítios ativos da lacase, incluindo ALA 106, GLY 227, ASN 229 e TYR 246, que desempenham papéis cruciais na estabilidade do complexo enzimático e na atividade catalítica da enzima.

Palavras-chave: Lacase, docking, ligante.

¹Graduanda em Engenharia de Biotecnologia e Bioprocessos, Unidade Acadêmica de Engenharia de Biotecnologia, UFCG, Sumé, PB, e-mail: liliansilvasantos552@gmail.com

²Doutor em Educação Física, Professor Adjunto IV, Unidade Acadêmica de Educação do Campo, UFCG, Sumé, PB, e-mail: bruno.medeiros@professor.ufcg.edu.br



**MODELING BIO-INSPIRED MIMETIC PEPTIDES IN FUNGAL LACCES WITH
POTENTIAL FOR USE IN BIOREMEDIALATION**

ABSTRACT

Laccase is a multicopper oxidase enzyme that generally has four copper atoms in its structure, which are responsible for the oxidation of the substrate. Due to its nonspecificity and high redox potential, laccase has been the target of research for possible use in bioremediation processes. Over the years, pollution has become an increasingly greater problem, partly due to population growth combined with the rapid rate of industrialization and poor treatment of urban solid waste (MSW). Leachate is a toxic liquid effluent found mainly in open-air dumps and landfills produced from the decomposition of organic matter. The main objective of this work was to evaluate, through in silico simulations, the interaction of the theoretical model of the fungal laccase from *Pleurotus ostreatus* with different pollutant compounds present in landfill leachate. Ten were chosen arbitrarily, including methoxyethyl acetate, 2-methyl-4,6-dinitrophenol, quinoline-2-carboxylic acid, 3,5-dinitrocyclohexan-1-one, among others. The simulation results indicated that laccase presents high affinity for several of the tested compounds, with Gibbs free energy values ranging from -8.3 kcal/mol to -6.0 kcal/mol. The compound 3-methyl-1,2-dihydrobenzo[*j*]aceantrylen-1-ol presented the highest affinity (-8.3 kcal/mol) followed by quinoline-2-carboxylic acid (-6.2 kcal/mol) and 9,9-dimethyl-10H-acridine (-6.5 kcal/mol). These compounds formed stable interactions with amino acid residues present in the active sites of laccase, including ALA 106, GLY 227, ASN 229, and TYR 246, which play crucial roles in the stability of the enzyme complex and the catalytic activity of the enzyme.

Keywords: Laccase, docking, ligand.