BUSCA DE INIBIDORES DE A-AMILASE E MODELAGEM DE GLICOHIDROLASE EM LINHAÇA (*Linum usitatissimum*)

Bruna Ukrainski (PROVIC/UEPG), Christiane Trevisan Slivinski, Renato Ferras Penteado, Jorge Iulek (Orientador), e-mail: iulek@uepg.br

Universidade Estadual de Ponta Grossa/Departamento de Química.

Área Ciências Exatas e da Terra, subárea Físico-Química, Química Teórica.

Palavras-Chave: *LuGa, modelagem computacional, proteínas.*

Resumo

A semente de linhaça (*Linum usitatissimum*) é um importante cereal utilizado na alimentação humana que vem ganhando destaque devido às suas propriedades nutricionais. Dentre as enzimas presentes nessas sementes, há as αλφα-galactosidases, que estão presentes em todos os tecidos que contém alfa-galactosídeos. Tais enzimas apresentam diferentes funções, dentre elas, a realização de hidrólise de resíduos terminais não redutores de alfa-D-galactose em alfa-D-galactosídeos. Com este enfoque, o vigente trabalho tem como intuito adquirir conhecimentos acerca da enzima alfa-galactosidase (*Lu*Ga) de *Linum usitatissimum*. Para isso, foi gerado um modelo tridimensional utilizando a modelagem por homologia.

Introdução

A linhaça (*Linum usitatissimum*) é a semente do linho, pertence à família Linaceae, muito utilizada na indústria de alimentos devido às suas propriedades nutracêuticas. Tal semente apresenta duas enzimas que são de particular interesse para o vigente trabalho: a alfa-galactosidase (*Lu*Ga) e a alfa-amilase. Para que se estude melhor a enzima, foram feitos modelos tridimensionais da LuGa através de modelagem por homologia.

Material e Métodos

A sequência de aminoácidos da *Lu*Ga foi obtida no UniProt (The UniProt Consortium, 2017). Um alinhamento estrutural foi feito entre a sequências de aminoácidos de proteínas homólogas e a da *LuGa* utilizando o programa TCOFFEE. A partir deste alinhamento foram construídos 500 modelos da *LuGa* com o programa MODELLER. Para avaliar as características do modelo, foi utilizado o programa PYMOL como ferramenta para possibilitar a visualização e comparação das estruturas.

Resultados e Discussão

O alinhamento estrutural foi utilizado juntamente com a sobreposição do modelo da *LuGa* com a homóloga de *Oryza sativa* (1UAS) para identificação de resíduos conservados e substituídos. Assim, foram determinados os resíduos catalíticos, a saber, Asp130 e Asp185, que são conservados em relação às demais homólogas. Outros resíduos conservados que chamam atenção são as Cys101 e Cys132, que formam uma das ligações dissulfetos da proteína, contribuindo para que haja a estabilização da mesma (Figura 1).

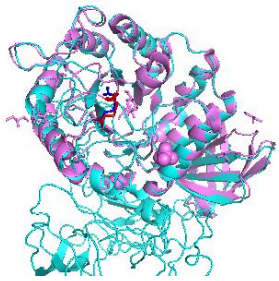


Figura 1. Sobreposição do modelo *Lu*Ga (ciano) com a 1UAS (violeta). Em destaque, em vermelho e azul, as ligações dissulfeto de 1UAS e *Lu*Ga, respectivamente.

No bolsão catalítico, Trp16/Trp122 e Trp164/Trp270, 1UAS/*Lu*Ga, ambos conservados, estão localizados na superfície das proteínas, contribuindo para sua formação. Outros resíduos que estão na superfície dp bolsão catalítico são His18/His124, que se conservam, enquanto que há a substituição Tyr20/Gln126. Como os resíduos aromáticos são frequentemente usados no reconhecimento das porções de açúcar em enzimas e lectinas, os resíduos citados acima podem ser considerados candidatos para o reconhecimento do substrato (FUJIMOTO, et. al, 2003).

Conclusão

O modelo da *LuGa* possibilitou a identificação de resíduos importantes na estrutura da enzima, bem como da composição de seus domínios estruturais, de acordo com o esperado para a família à qual ela pertence.

Agradecimentos

MEC, SESu, Grupo PET, FNDE.

The UniProt Consortium UniProt: the universal protein knowledgebase. *Nucleic Acids Res.* 2017; 45:D158–D169.

FUJIMOTO, Zui; SATOSHI, Kaneko; MOMMA, Mitsuru; KOBAYASHI, Hideyuki; MIZUNO, Hiroshi. Crystal Structure of Rice α-Galactosidase Complexed with D-Galactose, 2003.