



## CONTRIBUIÇÃO DE UM ESTUDO *IN SILICO* PARA A REDUÇÃO DE TOXICIDADE DO LIXIVIADO DE ATERRO SANITÁRIO

José Cordeiro do Nascimento Júnior<sup>1</sup>, Glauciane Danusa Coelho<sup>2</sup>

### RESUMO

Lacases são enzimas produzidas por basidiomicetos que são reconhecidas por detoxificar ambientes contaminados. Basidiomiceto *Pleurotus ostreatus* destaca-se pela capacidade de degradar uma variedade de compostos xenobióticos pela ação da lacase produzida por ele. Apesar disso, nos bancos de dados de proteínas não há depósito da estrutura cristalográfica da lacase desse basidiomiceto. Esse trabalho teve como objetivo desenvolver um modelo teórico da lacase de *P. ostreatus* para avaliar o potencial da lacase em degradar compostos tóxicos presentes no lixiviado de aterro sanitário. A sequência alvo da lacase (AAR21094.1) foi obtida no banco de dados do NCBI, o modelo foi construído pela técnica de modelagem por homologia a partir de possíveis estruturas molde obtidas no Protein Data Bank (PDB) utilizando o servidor Swiss-Model. Estudo do atracamento molecular entre a lacase e os compostos: 1,4-naftoquinona, dibenzo[a,c]antraceno, levometanfetamina, pirazinamida, o-anisidina foi realizado no programa AutoDock 1.5.6 com o Algoritmo Genético Lamarckiano. Foram identificados 58 possíveis estruturas molde, destas foram selecionadas três (1GYC, 2HRG e 5A7E), que possuem regiões conservadas referentes aos três domínios característicos da superfamília das cupredoxina. Modelo teórico da lacase de *P. ostreatus* criado apresentou qualidade estereoquímica e estrutural comprovada pelo gráfico de Ramachandran e pelos programas Verify 3D e Errat. Compostos avaliados no atracamento molecular apresentaram energia de ligação negativa e ocorrência de pontes de hidrogênio, com exceção do dibenzo[a,c]antraceno, indicando o potencial de aplicação da lacase *in vivo* e/ou *in vitro*, para o tratamento do lixiviado de aterro sanitário.

**Palavras-chave:** lacase, modelagem molecular, atracamento molecular

<sup>1</sup> Graduando em Engenharia de Biotecnologia e Bioprocessos, Unidade Acadêmica de Engenharia de Biotecnologia e Bioprocessos, UFCG, Campina Grande, PB, e-mail: josecordeiro86@outlook.com

<sup>2</sup> Doutora, Professora adjunta, Unidade Acadêmica de Engenharia de Biotecnologia e Bioprocessos, UFCG, Campina Grande, PB, e-mail: glauciane.danusa@professor.ufcg.edu.br



## **CONTRIBUTION OF AN *IN SILICO* STUDY TO REDUCE THE TOXICITY OF LANDFILL LEACHATE**

### **ABSTRACT**

Laccases are enzymes produced by basidiomycetes that are known to detoxify contaminated environments. Basidiomycete *Pleurotus ostreatus* stands out for its ability to degrade a variety of xenobiotic compounds through the action of its integrated laccase. Despite that, in the protein databases there is no deposit of the crystallographic structure of the laccase of this basidiomycete. This work aimed to develop a theoretical model of laccase from *P. ostreatus* to evaluate the potential of laccase in degraded toxic compounds present in landfill leachate. The laccase target sequence (AAR21094.1) was obtained from the NCBI database, the model was built by the homology modeling technique from possible template structures in the Protein Data Bank (PDB) using the Swiss-Model server. Study of the molecular docking between laccase and the compounds: 1,4-naphthoquinone, dibenzo [a, c] anthracene, levomethamphetamine, pyrazinamide, o-anisidine was carried out in the AutoDock 1.5.6 program with the Lamarckian Genetic Algorithm. Fifty-eight possible structures were identified, three of which were selected (1GYC, 2HRG and 5A7E), which have conserved regions referring to the three characteristic domains of the cupredoxin superfamily. Theoretical model of the *P. ostreatus* laccase created presented stereochemical and structural quality confirmed by the Ramachandran plot and by the Verify 3D and Errat programs. Molecular docking has negative bond energy and the occurrence of hydrogen bonds between the studied compounds, except for dibenzo [a, c] anthracene, indicating the potential application of laccase *in vivo* and / or *in vitro*, for the treatment of landfill leachate.

**Keywords:** laccase, molecular modeling, molecular docking.