



POTENCIAL DA LACASE DE *Pleurotus ostreatus* DE DEGRADAR MICROPOLUENTES PRESENTES NO LIXIVIADO DE ATERRO SANITÁRIO, UM ESTUDO *IN SILICO*.

Isac Antonio Alcantara Queiroz¹, Glauciane Danusa Coelho²

RESUMO

Aumento da população levou a maior geração de resíduos sólidos urbanos, os quais geralmente são depositados em aterros sanitários. Presença de umidade nos aterros sanitários gera o lixiviado, que é constituído, entre outras moléculas, pelos micropoluentes, que tem elevado potencial tóxico, bem como propriedades persistentes e bioacumulativas, que causam prejuízos ambientais e para os seres humanos, além de não serem monitoradas pelos órgãos de controle ambiental. Oliveira (2019) identificou 54 micropoluentes no lixiviado do Aterro Sanitário Metropolitano de João Pessoa (ASMJP), evidenciando urgência no tratamento desse efluente. Estudos de digestão anaeróbia para tratamento do lixiviado mostram que a toxicidade dos micropoluentes limita a eficiência do processo. Por outra via, fungos basidiomicetos apresentam maior resistência a condições adversas devido a produção de um complexo ligninolítico, que inclui a lacase, capaz de degradar compostos tóxicos. Objetivou-se estudar *in silico* o atracamento molecular entre a lacase de *Pleurotus ostreatus* e os micropoluentes do lixiviado de ASMJP. Estruturas tridimensionais dos ligantes foram obtidas em bancos de dados (Pubchem e Chempider). Modelo teórico da lacase construído no Modeller foi empregado no atracamento molecular utilizando-se UCSF Chimera e Autodock Vina. Resultados foram analisados no Discovery Studio. Após triagem das moléculas mais preocupantes, foram selecionadas 35, das quais 25 apresentaram características que indicam a possibilidade de serem degradáveis pela lacase de *Pleurotus ostreatus* pela ocorrência de energia livre de ligação negativa e pontes de hidrogênio com aminoácidos presentes no sítio ativo da enzima. A lacase mostrou potencial para o tratamento dos micropoluentes presentes no lixiviado do ASMJP.

Palavras-chave: Basidiomiceto, enzimas ligninolíticas, atracamento molecular

¹Discente do curso Engenharia de Biotecnologia e Bioprocessos, UAEB, UFCG, Sumé, PB, e-mail: isacalcantara2013@gmail.com

²Doutora, Docente, UAEB, UFCG, Sumé, PB, e-mail: glauciane@ufcg.edu.br



LOREM IPSUM DOLOR SIT AMET, CONSECTETUR ADIPISCING ELIT. NULLAM ACCUMSAN NEQUE SED DUI ULTRICES ELEIFEND.

ABSTRACT

Population growth has led to greater generation of urban solid waste, which is usually deposited in landfills. The moisture present in landfills generates leachate. Among the compounds present in the leachate are the micropollutants, they are molecules with high toxic potential, persistent and bioaccumulative properties, they cause negative effects for the organism/environment and are not monitored by the environmental control agencies. Oliveira (2019) identified 54 micropollutants in the leachate from the Metropolitan Sanitary Landfill of João Pessoa (MSLJP), demonstrating urgency in the treatment of this effluent. Anaerobic digestion studies for leachate treatment show that the toxicity of micropollutants limits the efficiency of the process. Basidiomycete fungi show greater resistance to adverse conditions due to the production of a ligninolytic complex, which includes laccase, capable of degrading toxic compounds. Objetivou-se estudar o atracamento molecular entre a lacase de *Pleurotus ostreatus* e os micropoluentes do lixiviado de MSLJP. Three-dimensional structures of the ligands were obtained from databases (Pubchem and Chempider). Theoretical model of laccase built in Modeller was used in molecular docking using UCSF Chimera and Autodock Vina. The results were analyzed in Discovery Studio. The most worrisome molecules were screened. Thirty-five molecules were selected for the molecular docking study, of which 25 were likely to be degradable by the laccase because they have negative bond free energy and hydrogen bonds with amino acids present in the active site of the enzyme. It was concluded that Lacase has potential application for the treatment of micropollutants present in the MSLJP leachate.

Keywords: Basidiomycete, ligninolytic enzymes, docking

¹Discente do curso Engenharia de Biotecnologia e Bioprocessos, UAEB, UFCG, Sumé, PB, e-mail: isacalcantara2013@gmail.com

¹Doutora, Docente, UAEB, UFCG, Sumé, PB, e-mail: glauciane@ufcg.edu.br