

# USO DO SOFTWARE DE ANÁLISE ESTRUTURAL UCFS CHIMERA NA DETERMINAÇÃO DA COMPOSIÇÃO DE AMINOÁCIDOS PRESENTES NA SUPERFÍCIES DE LIPASES: UMA ETAPA ESSENCIAL NA ESCOLHA DO MÉTODO DE IMOBILIZAÇÃO.

Joao Matheus Fonteles Silva, Isabela Oliveira Costa, Nathalia Saraiva Rios, Luciana Rocha Barros Gonçalves, Luciana Rocha Barros Goncalves

Lipases estão entre as enzimas mais utilizadas, tanto em níveis industriais quanto a níveis laboratoriais, devido a sua capacidade de catalisar diferentes tipos de reações e manter uma elevada estabilidade e atividade sob diferentes condições reacionais. Principalmente na área industrial, é desejável que essas enzimas sejam utilizadas em sua forma imobilizada, uma vez que o catalisador imobilizado exibe diversas vantagens em comparação com sua forma livre. O processo de imobilização permite a reutilização da enzima em múltiplos ciclos de reação, reduzindo o custo do processamento e recuperando a enzima pós reação, evitando a contaminação do produto final. A chave para a escolha de um método de imobilização eficiente consiste no estudo da estrutura de aminoácidos da superfície da enzima. Deve-se conhecer quais resíduos são os mais importantes para garantir a imobilização da Lipase em um suporte específico, seja por adsorção ou ligação covalente. Com o objetivo de analisar a composição de aminoácidos de diferentes lipases, o software de análise estrutural UCFS CHIMERA foi utilizado e a partir dele foram evidenciadas a quantidade e a natureza dos resíduos de aminoácidos que compõem as lipases. As estruturas das lipases foram obtidas no Protein Data Bank (PDB) e foram marcadas diferentes classes de resíduos diretamente na cadeia peptídica, como hidrofóbicos, positivos, aromáticos e aminoácidos específicos, como lisinas, histidinas, serinas, etc. Também foi marcado o sítio ativo e a tampa dessas lipases para observar a proximidade desses resíduos à essas regiões. A partir dessas análises foi possível escolher um protocolo inicial de imobilização para cada lipase estudada. Conclui-se então que o uso do software CHIMERA para esse estudo serviu como base para a escolha de métodos de imobilização e a análise de resíduos é uma etapa inicial e essencial para consolidar essa escolha. Agradecimento a CAPES, ao CNPq e a FUNCAP pelo financiamento deste trabalho.

Palavras-chave: LIPASES. CHIMERA. IMOBILIZAÇÃO. AMINOÁCIDOS.