



MODELAGEM COMPARATIVA E DOCKING MOLECULAR DA ENZIMA LACTASE – INTERAÇÕES COM A LACTOSE

Wagner Bernardo da Silva¹, Rafael Trindade Maia²

RESUMO

A lactase (LCT) é uma importante enzima secretada no epitélio do intestino delgado e tem como principal função digerir o dissacarídeo lactose, que é o principal carboidrato presente no leite e derivados, convertendo-a nos monossacarídeos glicose e galactose. Contudo, a falta parcial ou total dessa enzima lactase no organismo pode caracterizar um quadro clínico denominada intolerância à lactose. Considerado-se que a função das enzimas está diretamente relacionada com a sua estrutura tridimensional, ferramentas da bioninformática como a modelagem por homologia vem sendo aplicado no estudo de elucidação de proteínas. Dessa forma, devido a disponibilidade da sequência da lactase em banco de dados, o presente estudo visou construir um modelo para a lactase, através do uso de técnica computacional, utilizando o método de modelagem por homologia. Foram encontradas duas sequências de lactase humana. Os modelos foram construídos com o auxílio do software Swiss model e validado através do programa PROCHECK. Com o auxílio do GHECOM também foi realizado uma busca dos aminoácidos que estariam envolvidos na composição do sítio catalítico da Lactase. Logo após, com o modelo construído, foi realizado o docking molecular com a lactose no programa AUTODOCK 1.5.6, para a verificação de possíveis conjugações entre o substrato e a enzima. A modelagem das enzimas lactase humana foram bem sucedidas e através da estrutura 3D criada foi possível identificar os resíduos de aminoácidos que compõe o sítio catalítico de ambas. Dessa forma, com auxílio da ferramenta de docking molecular foi possível analisar as interações a nível molecular entre a lactose e as enzimas lactases.

Palavras-chave: Lactase, Modelagem Comparativa, Bioinformática.

¹Aluno de Farmácia, Departamento de educação em saúde, UFCG, Campina Grande, PB, e-mail: bernardodswagner@gmail.com

²<Titulação>, <Função>, <Departamento>, UFCG, Campina Grande, PB, e-mail: emaildoorientador@seuprovedor.com



**COMPARATIVE MODELING AND MOLECULAR DOCKING OF LACTASE
ENZYME – INTERACTIONS WITH LACTOSE**

ABSTRACT

Lactase (LCT) is an important enzyme secreted in the epithelium of the small intestine and its main function is to digest the disaccharide lactose, which is the main carbohydrate present in milk and dairy products, converting it into the monosaccharides glucose and galactose. However, the partial or total lack of this lactase enzyme in the body can characterize a clinical condition called lactose intolerance. Considering that the function of enzymes is directly related to their three-dimensional structure, bioinformatics tools such as homology modeling have been applied in the study of protein elucidation. Thus, due to the availability of the lactase sequence in the database, the present study aimed to build a model for lactase, through the use of a computational technique, using the homology modeling method. Two human lactase sequences were found. The models were built with the help of the Swiss model software and validated through the PROCHECK program. With the help of GHECOM, a search for the amino acids that would be involved in the composition of the catalytic site of Lactase was also carried out. Soon after, with the model built, molecular docking was performed with lactose in the AUTODOCK 1.5.6 program, to verify possible conjugations between the substrate and the enzyme. The modeling of human lactase enzymes was successful and through the 3D structure created it was possible to identify the amino acid residues that make up the catalytic site of both. Thus, with the aid of the molecular docking tool, it was possible to analyze the interactions at the molecular level between lactose and lactase enzymes.

Keywords: Lactase, Comparative Modeling, Bioinformatics.