

ESTUDO BIOQUÍMICO ESTRUTURAL DA ENZIMA ALFA-GALACTOSIDASE A, UTILIZANDO O SOFTWARE RASMOL COMO FERRAMENTA DE SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL (APOIO UNIP)

Aluna: Bárbara Sampaio Dias Martins Mansano

Orientador: Prof. Dr. Renato Massaharu Hassunuma

Curso: Biomedicina

Campus: Bauru

A doença de Fabry é uma herança monogênica recessiva ligada ao cromossomo X, causada por uma mutação localizada na região Xq22.1 do gene GALA, responsável por codificar a enzima alfa-galactosidase. Esta doença possui uma prevalência estimada de um caso em cada 40.000 a 60.000 indivíduos do sexo masculino ou um a cada 117.000 nascidos vivos, representando, assim, a segunda alteração mais frequente por acúmulo lisossômico nos humanos. Devido à sua importância epidemiológica, a atual pesquisa tem como objetivo geral realizar um estudo bioquímico estrutural utilizando o *software RasMol* como ferramenta de simulação computacional da enzima alfa-galactosidase A. Foi realizado um levantamento de arquivos relacionados à enzima alfa-galactosidase com extensão .pdb no site *Protein Data Bank*, sendo escolhido o arquivo *PDB 3HG2*. Este arquivo forneceu dados relacionados à estrutura molecular da enzima, como código; nome da molécula; origem do arquivo e classificação da molécula; número de cadeias, de grupos, de átomos e de ligações presentes na molécula; número de hélices alfa e de curvas presentes na molécula; sequência dos aminoácidos que compõem a molécula; posição de elementos de estrutura secundária (hélices *alfa* e folhas *beta*) e coordenadas da posição nos eixos x, y e z dos átomos que compõem a molécula. Também foi realizada a tradução integral do artigo que gerou o arquivo *PDB* selecionado. Baseados nos resultados obtidos e nas descrições apresentadas no artigo, foram criados *scripts* por meio do *software RasMol 2.7.4.2*, que ilustram a estrutura da molécula. Desta forma, os

resultados obtidos neste projeto fornecem dados bioquímicos estruturais importantes relacionados à enzima alfa-galactosidase A, que poderão ser utilizados em futuras pesquisas relacionadas à compreensão da ação enzimática desta molécula e ao tratamento da doença de Fabry.