



**CONEPE 2017**  
**IV CONGRESSO DE ENSINO,  
PESQUISA E EXTENSÃO**



**Conhecimento, escolhas  
e transformação**

**INSTITUTO  
FEDERAL  
Fluminense**  
Campus  
Campos Guarus

ISSN 2525-975X

## **CONSTRUÇÃO DO MODELO DO SÍTIO ATIVO DA AChE DE Aedes Aegypti**

**DANIEL ROSA DA SILVA, VICENTE ANTONIO DE SENNA JUNIOR, DOUGLAS BATISTA DA SILVA  
e MAYARA KETHELLIN DA SILVA SANTOS**

CONSTRUÇÃO DO MODELO DO SÍTIO ATIVO DA AChE DE Aedes Aegypti. As enzimas colinesterases se dividem em acetilcolinesterases e butirilcolinesterases, cada uma com diferentes especificidades por seus substratos. As colinesterases pertencem à família das hidrolases de serina, que fazem parte de uma família maior, as alfa/beta ( $\alpha/\beta$ ) hidrolases. Essas enzimas desempenham papéis importantes na neurotransmissão colinérgica central e periférica, sendo classificadas de acordo com suas propriedades catalíticas e especificidades a substratos, sensibilidade a inibidores e distribuição tecidual. A AChE tem especificidade para o neurotransmissor acetilcolina (ACh) e interrompe a transmissão dos impulsos nervosos pela rápida hidrólise desse neurotransmissor na membrana pós-sináptica da junção neuromuscular. A AChE de T. californica (TcAChE) apresenta grande similaridade em relação às AChE de mamíferos. Por possuir cerca de 60% de identidade em suas estruturas primárias, estas enzimas apresentam grande semelhança em suas estruturas tridimensionais, juntamente com outras enzimas da família de  $\alpha/\beta$  hidrolases. O alinhamento das sequências primárias do modelo e da proteína molde foi feito no programa NCBI BLASTP 2.2.17. Estas sequências apresentam 48% de identidade e 63% de similaridade. Para este estudo, foi construído inicialmente um modelo 3D da AChE de Ae. aegypti (AeAChE). O modelo 3D da sequência de aminoácidos Q6A2E2 foi obtido por modelagem comparativa com a estrutura cristalográfica da AChE de T. californica com o código 2CMF. O número de aminoácidos na estrutura gerada pelo Swiss Model que se encontram fora da região mais provável é baixo, sete aminoácidos, um percentual de 0,99%, indicando a boa qualidade dos modelos. A qualidade absoluta é calculada relacionando-se as características estruturais do modelo com estruturas experimentais de tamanho semelhante.

Palavras-chave: Modelo. AChE. Aedes Aegypti.