



XI ENCONTRO BRASILEIRO DE ECOLOGIA QUÍMICA XI BRAZILIAN MEETING ON CHEMICAL ECOLOGY

October 23-26, 2019

Maceió, Brazil

INVESTIGAÇÃO DOS MODOS DE LIGAÇÃO DE LIGANTES DA PROTEÍNA LIGADORA DE FEROMÔNIO DO BICHO DA SEDA ATRAVÉS DE DOCKING MOLECULAR

Maria Jeane Vieira da Silva¹; Sérgio Modesto Vechi²; Neila da Silva Paschoal³.

Universidade Federal de Alagoas; ¹jeanevairads@gmail.com; ²vechism@gmail.com; ³neilapaschoal@gmail.com.

PALAVRAS-CHAVE: CONTROLE DE PRAGAS; PROTEÍNAS LIGADORAS DE FEROMÔNIOS; DOCKING MOLECULAR.

RESUMO: Inseticidas são comumente utilizados no controle de pragas em lavouras. No entanto, apesar de serem eficientes para a grande maioria dos insetos, podem causar resistência em algumas espécies, são nocivos à saúde humana, podem eliminar insetos benéficos, e podem contaminar a água de rios e mananciais. Com isso, a tecnologia vem se baseando na utilização de feromônios para controlar e monitorar as pragas em diferentes lavouras. Este é um método seguro e racional, com potencial de utilização em programas de manejo integrado de pragas, pois possibilita uma redução significativa ou até mesmo a eliminação do uso de defensivos químicos nas lavouras. A percepção dos feromônios pelos insetos ocorre através de uma série complexa de eventos e existem proteínas, denominadas proteínas ligadoras de odor, que auxiliam na captura e transporte dos feromônios para os receptores. Neste trabalho, utilizou-se como alvo a proteína ligadora de feromônio do bicho da seda (PDB ID: 1DQE), que age no organismo do inseto. Além disso, 52 ligantes distintos, encontrados na plataforma *The Pherobase*, foram testados, através de docking molecular, como potenciais candidatos a inibir esta proteína. Resultados preliminares mostram que 12 dos 52 ligantes testados obtiveram energia de ligação inferior ao docking com o ligante original (HEXADECA-10,12-DIEN-1-OL) e poderiam ser testados experimentalmente para verificação de sua atividade inibitória.

INVESTIGATION OF LIGAND BINDING MODES FROM THE PHEROMONE BINDING PROTEIN OF SILKWORM THROUGH MOLECULAR DOCKING

KEYWORDS: PEST CONTROL; PHEROMONE BINDING PROTEINS; MOLECULAR DOCKING.

ABSTRACT: Insecticides are commonly used in pest control in crops. However, although they are efficient for the vast majority of insects, they can cause resistance in some species, are harmful to human health, can eliminate beneficial insects, and can contaminate river and spring water. Thus, the technology has been based on the use of pheromones to control and monitor pests in different crops. This is a safe and rational method with potential for use in integrated pest management programs, as it enables a significant reduction or even elimination of the use of pesticides in crops. Insect pheromone perception occurs through a complex series of events and there are proteins called odorant binding proteins that aid in the capture and transport of pheromones to receptors. In this work, the target was the silkworm pheromone binding protein (PDB ID: 1DQE), which acts on the insect organism. In addition, 52 distinct ligands found on The Pherobase platform were tested by molecular docking as potential candidates to inhibit this protein. Preliminary results show that 12 of the 52 ligands tested had lower binding energy than docking with the original ligand (HEXADECA-10,12-DIEN-1-OL) and could be experimentally tested for inhibitory activity.