



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

October 23-26, 2019
Maceió, Brazil

ESTUDO DO DOCKING MOLECULAR DA PROTEÍNA LIGADORA DE ODOR DO BICHO-DA-SEDA

Neila da Silva Paschoal¹; Sérgio Modesto Vechi²; Maria Jeane Vieira da Silva³.

Universidade Federal De Alagoas; [1neilapaschoal@gmail.com](mailto:neilapaschoal@gmail.com); [2vechism@gmail.com](mailto:vechism@gmail.com); [3jeanevieirads@gmail.com](mailto:jeanevieirads@gmail.com).

PALAVRAS-CHAVE: PROTEÍNA; LIGAÇÃO DE ODOR; DOCKING MOLECULAR.

RESUMO: Em muitas espécies de insetos, acredita-se que as proteínas ligadoras de odores (OBPs) sejam responsáveis pelo transporte de feromônios e outros semioquímicos através da linfa sensitiva até os receptores olfativos (ORs) dentro das sensilas antenais. O presente trabalho teve como objetivo a utilização da técnica de Docking Molecular para a obtenção de energias livres de ligação entre o ligante natural e ligantes similares da proteína do BMori GOBP (Proteínas Ligadoras de Odores Gerais), 2WC5 (código PDB) obtida no Protein Data Bank. Os resíduos da proteína, como moléculas de água, magnésio e o ligante hexadeca-10,12-dien-1-ol, foram removidos pelo software Chimera 1.10.2. À proteína ligadora de odores gerais foram adicionados hidrogênios polares e foi construído o espaço de pesquisa baseado no ligante da proteína, no qual as coordenadas do sítio de ligação foram determinadas utilizando o software AutoDock Tools. Também por meio do software AutoDock Tools foi convertido o formato do arquivo PDB para PDBQT. Com os softwares AutoDock Vina 1.1.2 e ArgusLab 4.0.1 foram realizadas simulações de re-docking, docking e cross-docking molecular do ligante hexadeca-10,12-dien-1-ol na proteína para obter o ranking das poses do ligante e a energia de afinidade de ligação. Para a realização do docking e cross-docking, a escolha dos ligantes foi feita através da semelhança da fórmula molecular estrutural no banco de dados The Pherobase. Portanto, foi possível demonstrar que, para os ligantes propostos, as energias de ligação proteína-ligante mais estáveis obtidas nos dockings, foram de ligantes que tinham estruturas cíclicas, entretanto a energia desses ligantes foram mais baixas do que o ligante original.

STUDY OF MOLECULAR DOCKING IN SILKWORM ODORANT BINDING PROTEIN

KEYWORDS: PROTEIN, BINDING OF ODOR; DOCKING MOLECULAR.

ABSTRACT: In many insect species, it is believed that odorant binding proteins (OBPs) are responsible for transport of pheromones and other semiochemicals through the sensory lymph to the olfactory receptors (Ors) within the antenna sensilla. The present study was aimed to use the technique of molecular docking to obtain the connection-free energies between the natural ligand and similar ligands of the BMori GOBP protein (General Odorant Binding Protein), 2WC5 (PDB code) obtained from the Protein Data Bank. Protein residues, such as water molecules, magnesium and the hexadeca10,12-dien-1-ol, were removed by using the software Chimera 1.10.2. Polar hydrogens were added to the general odorant binding protein and the protein ligand-based search space was constructed, in which the coordinates of the binding site were determined using the AutoDock Tools software. Nevertheless, through the software AutoDock Tools the PDB file was converted to the PDBQT format. With AutoDock Vina 1.1.2 and ArgusLab 4.0.1 software, simulations of re-docking, docking and molecular cross-docking of the hexadeca-10,12-dien-1-ol ligand were performed to the protein to obtain the ranking of ligand poses and binding affinity energies. For docking and cross-docking, the choice of ligands was done through the similarity of the structural molecular formula in The Pherobase database. Hence, it was possible to demonstrate that, for the proposed ligands, the most stable protein-ligand binding energies obtained in the dockings were of ligands that had cyclic structures, although the energy of these ligands were lower than the original ligand.