

Inibição de tripsinas de *Anticarsia gemmatalis* pelo inibidor de protease da *Adenanthera pavonina*: abordagem por dinâmica molecular, cinética enzimática e análises de sobrevivência.

Gabriele Corrêa da Rocha¹, Maria Goreti de Almeida Oliveira¹, Yaremis Meriño Cabrera¹, José Severiche Castro², Samuel Lessa Barbosa¹ e Veronica Aparecida Faustino¹.

¹Departamento de Bioquímica e Biologia Molecular, Universidade Federal de Viçosa, BIOAGRO-UFV.

²Departamento de Ciências exatas, Programa de pós-graduação em Física, Universidade Estadual de Londrina. Centro de Ciências Biológicas e da Saúde. Área temática: Bioquímica. Categoria: Pesquisa.

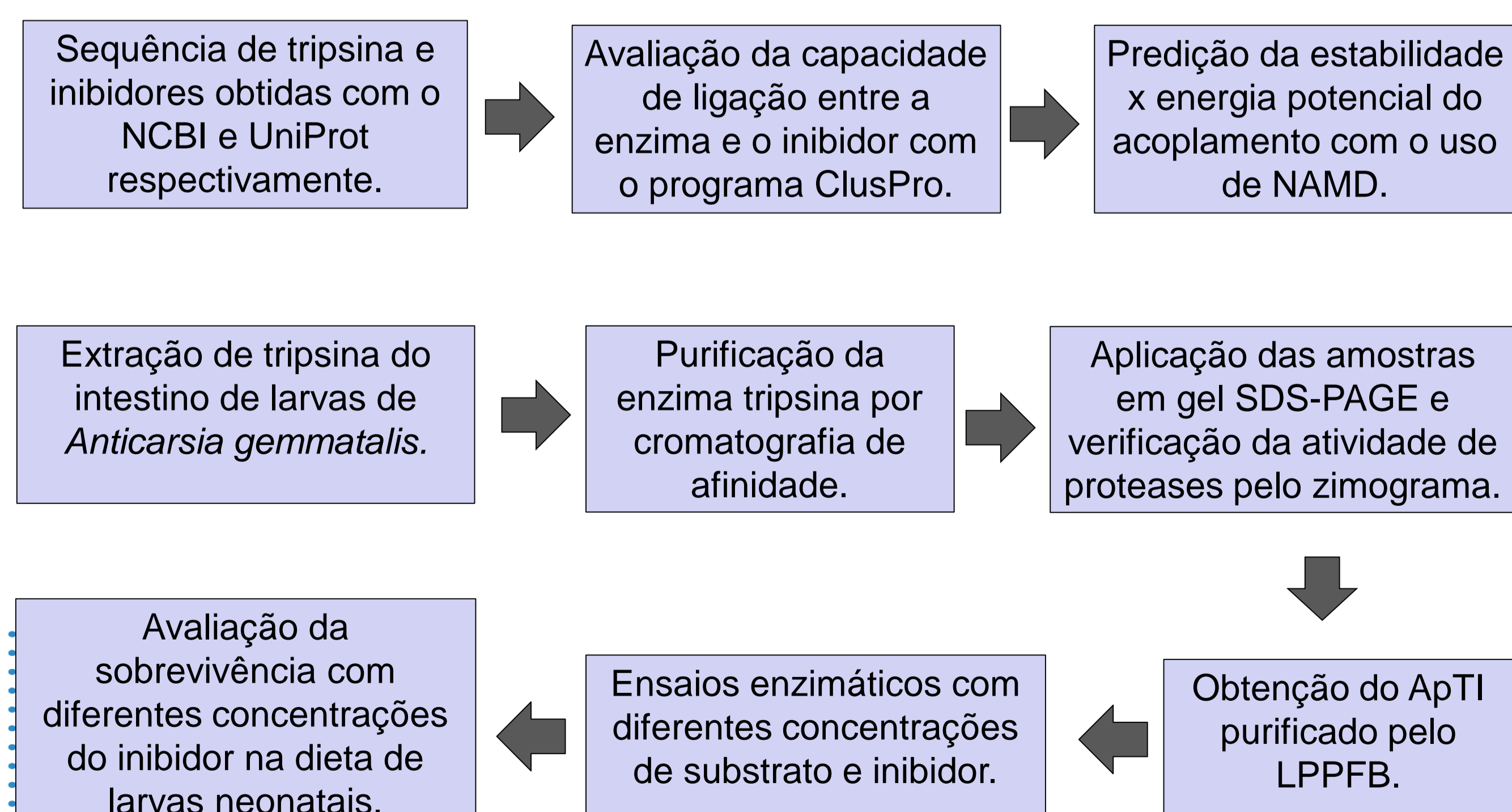
Introdução

Anticarsia gemmatalis é uma das principais pragas que atacam a soja, um importante produto do agronegócio brasileiro. A perda econômica provocada por estes insetos levou à busca de novas estratégias menos tóxicas para o controle dessas pragas, incluindo os inibidores de proteases (IPs), importantes constituintes defensivos de plantas. Estudos recentes demonstram que as sementes de *Adenanthera pavonina* possuem um alto teor de IPs podendo ser uma alternativa de controle dessas pragas, pois quando ingeridos, provocam a inibição da digestão proteolítica e consequentemente afetam a disponibilidade de aminoácidos essenciais para o crescimento e reprodução. Nesse contexto, o ApTI (inibidor de tripsina de *Adenanthera pavonina*) pode ser uma alternativa promissora para o controle de *A. gemmatalis* devido à sua atividade inibitória e baixa toxicidade.

Objetivos

Avaliar a capacidade do ApTI (inibidor da tripsina de *Adenanthera pavonina*) de inibir enzimas tripsina-like de *Anticarsia gemmatalis* por docking e dinâmica molecular e ensaios cinéticos e de sobrevivência.

Material e Métodos



Resultados e Discussão

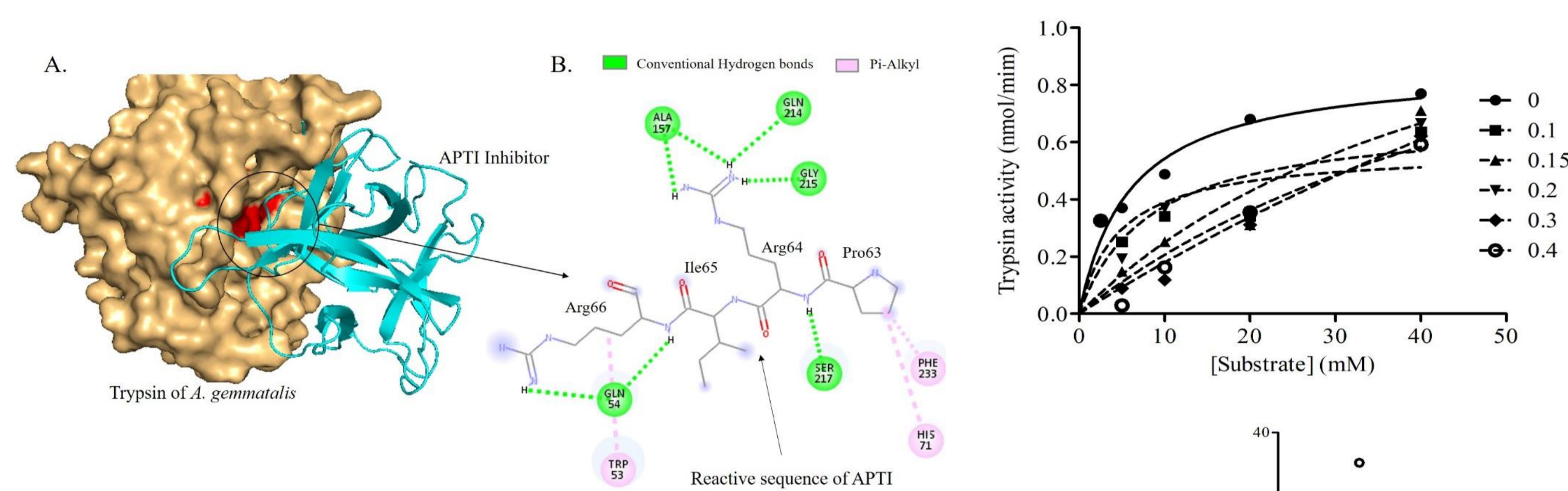


Figura 1: Complexo ApTI-tripsina. A) Site ativo do inibidor bloqueando o acesso do substrato. B) Resíduos inibidores envolvidos na interação (Pro63, Arg64, Ile65 e Arg66).

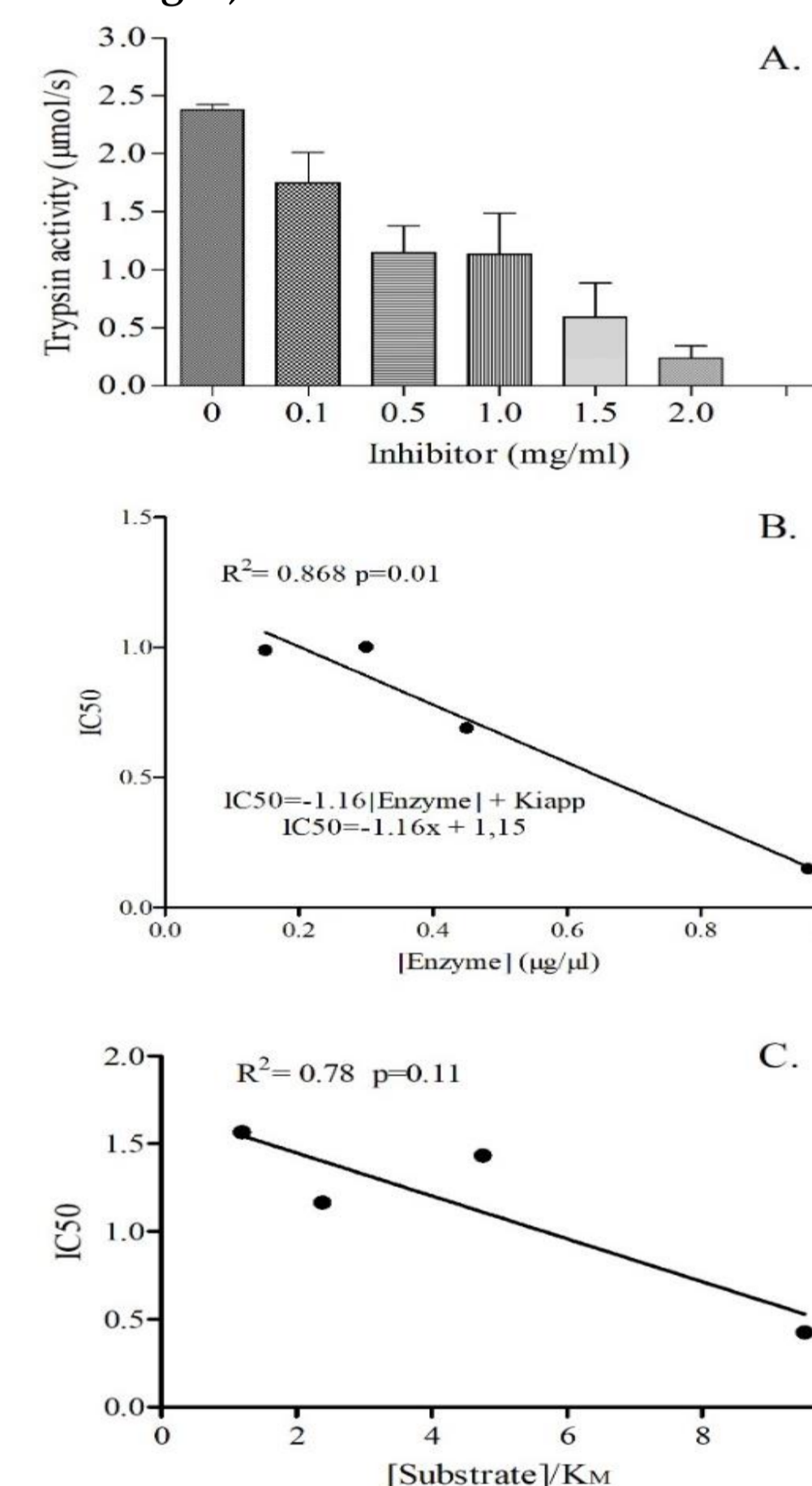


Figura 3: A) Atividade de tripsina na presença do inibidor. B e C) Relação entre o IC₅₀ do ApTI em função da concentração da enzima e do substrato, respectivamente.

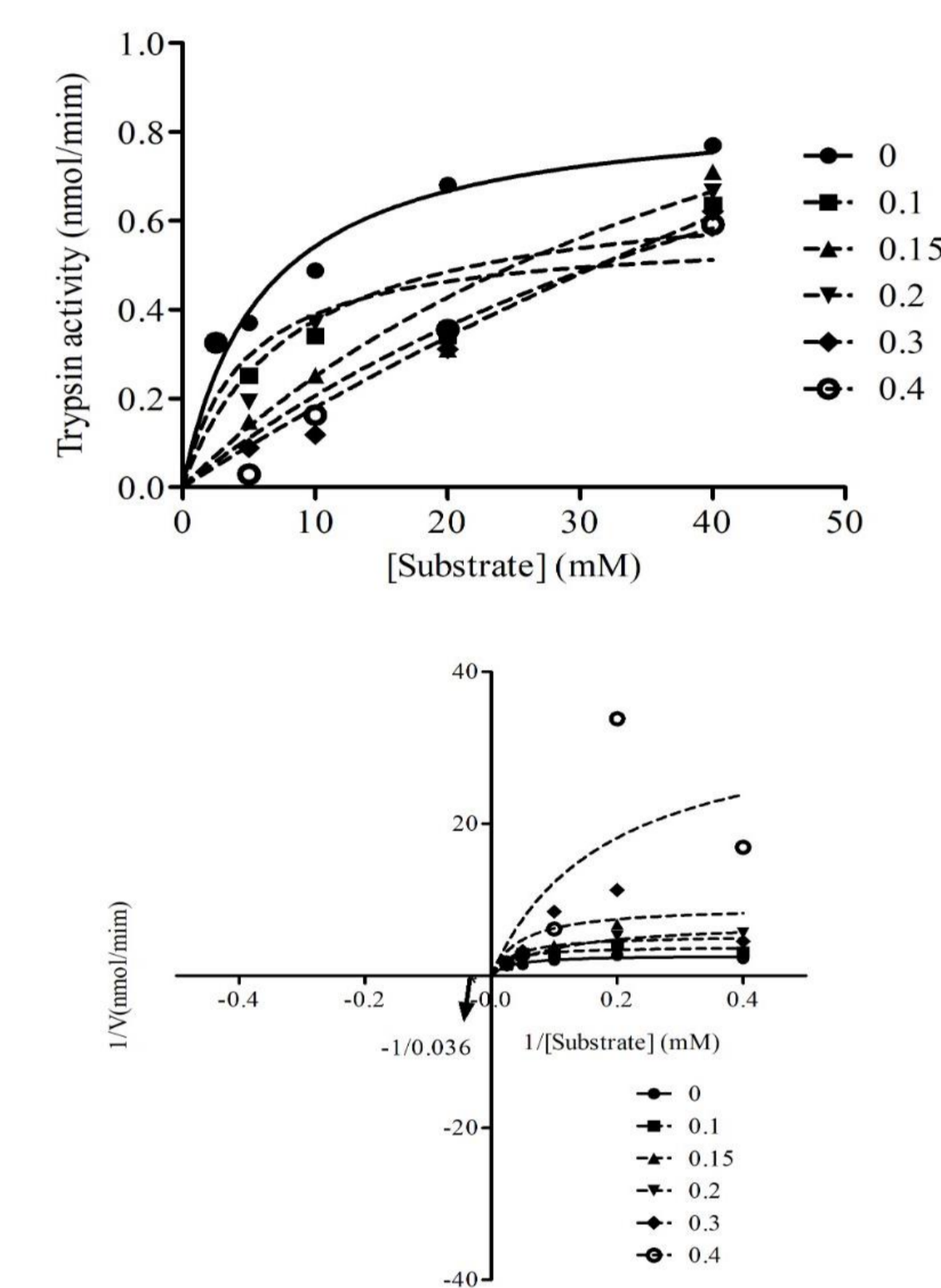


Figura 2: Atividade de tripsina na presença de diferentes concentrações do substrato L-BApNA e do inibidor ApTI e cinética enzimática do ApTI.

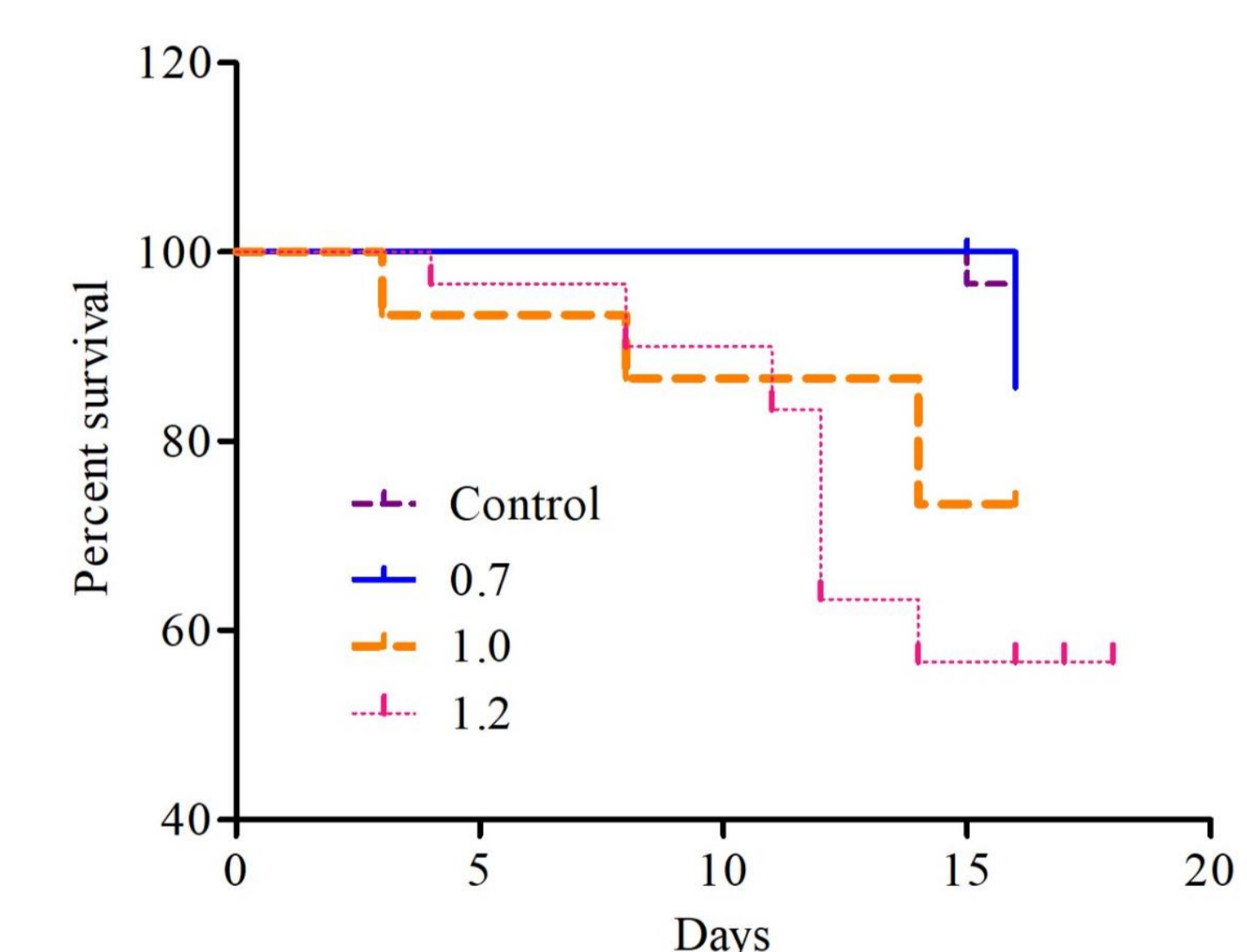


Figura 4: Curvas de sobrevivência de *Anticarsia gemmatalis* alimentadas com dieta contendo diferentes concentrações de ApTI.

O ApTI é um inibidor não competitivo que realiza quatro interações com a região enzimática que impedem o acesso do substrato e ajudam a estabilizar o complexo enzima-inibidor. Quando incluído na dieta, é possível obter 60% de mortalidade com doses de 1,2% do mesmo.

Conclusões

O ApTI é um forte inibidor não competitivo de tripsina e apresenta potencial biotecnológico como agente contra o inseto *A. gemmatalis* além de ser um forte candidato para desenho de moléculas bio-inseticidas.

Apoio Financeiro



Agradecimentos

