

Docking molecular das interações entre BPTI e diversas *trypsina-like* proteases de *Anticarsia gemmatalis*.

Barros, R. A¹; Oliveira, M. G. A¹; Oliveira, J.V.A.R¹; Paiva, S.I.S¹; Barbosa, S.L.¹; Oliveira, C.N¹.

¹Departamento de Bioquímica e Biologia Molecular, Universidade Federal de Viçosa (UFV), BIOAGRO-UFV, MG, Brazil
Área temática: Ciências Agrárias. Grande Área: Centro de Ciências Biológicas e da Saúde. Categoria: Pesquisa.

Introdução

Os IPs são agentes antimetabólicos que inibem proteases digestivas presentes no trato digestório de insetos praga, podendo causar redução de peso, sobrevivência e reprodução. Com base nisto, estas moléculas se tornaram alvos para o desenvolvimento de biopesticidas. No entanto, a maioria das pesquisas são desenvolvidas extraindo-se IPs de plantas e expondo os insetos. Devido às longas histórias de associação próxima entre herbívoros e plantas, os insetos desenvolveram mecanismos de adaptação. Sendo assim, a utilização de IPs de espécies sem associação próxima e.g., mamífero, podem contrapor o efeito adaptativo dos herbívoros.

Objetivos

Neste trabalho, nós fizemos análises *in silico* da interação entre o inibidor BPTI (*Bovine Pancreatic Trypsin Inhibitor*) e sequências de tripsina de lagarta-da-soja (*Anticarsia gemmatalis*) identificadas em um trabalho anterior por espectrometria de massas, para identificar loops reativos e avaliar as principais interações químicas.

Material e Métodos



- TRY1 (XM_004929984.2)
- TRY2 (XM_004931762.2)
- TRY3 (XM_004927083.2)
- TRY4 (XM_012688545.1)
- BOVTRY (XP_584594)



Resultados e Discussão

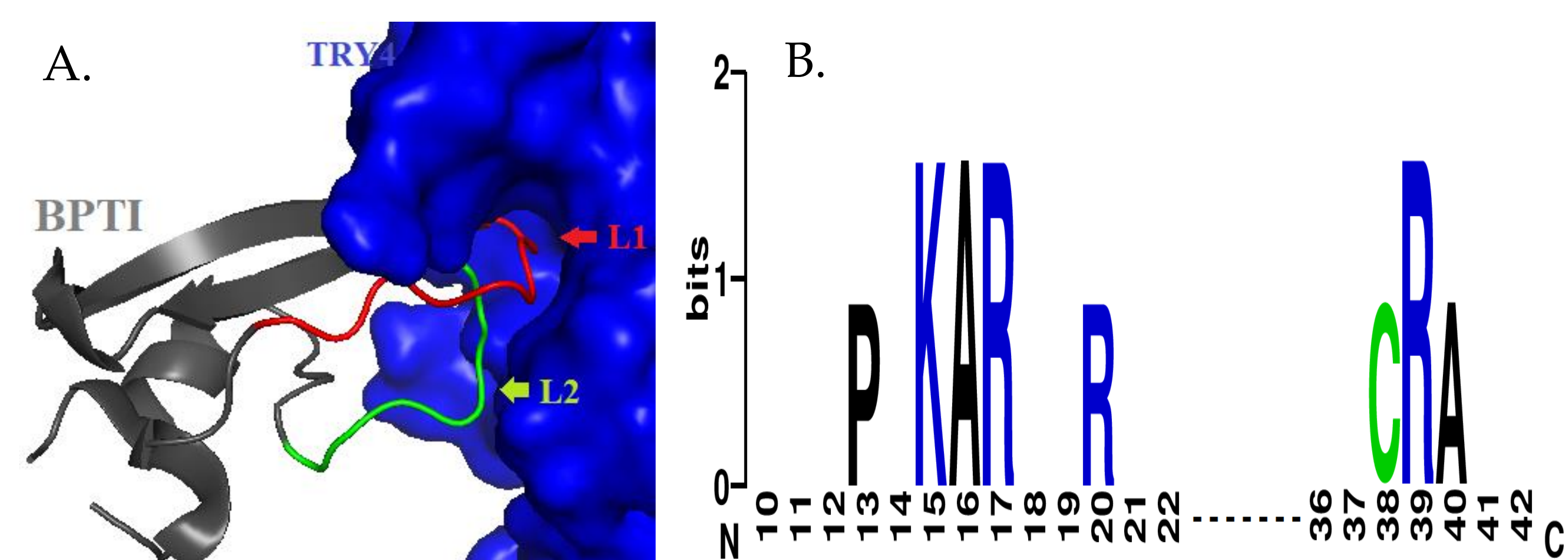


Figura 1: Docking molecular BPTI-Try4, L1(PYTGPCCKAR) e L2(YGGCRAKR) (A). Resíduos dos loops que mais interagem L1(12-20) e L2(38-40).

LOOP 1 (PYTGPCCKAR)	Hydrogen Bonds	Alkyl Bonds	Carbon-Hydrogen Bonds
BOVTRY	12	4	1
TRY1	9	2	
TRY2	5	6	1
TRY3	13	2	
TRY4	6	4	1
(Mean ± SE)	9 ± 1.6a	3.6 ± 0.8b	0.6 ± 0.2b
LOOP 2 (YGGCRAKR)	Hydrogen Bonds	Alkyl Bonds	Carbon-Hydrogen Bonds
BOVTRY	2	1	
TRY1	7	1	
TRY2	4	2	
TRY3	13	2	
TRY4	5	1	
(Mean ± SE)	6.2 ± 1.9a	1.4 ± 0.2b	

Figura 2: Ligações químicas entre os loops e as tripsinas. Letras diferentes indicam diferença estatística por tukey $p < 0.05$.

Conclusões

A predição por docking molecular indica que o BPTI se liga às tripsinas preditas de *A. gemmatalis* por meio dois loops reativos (L1 e L2). Nós acreditamos que esse conhecimento é importante para o desenvolvimento de novos biopesticidas baseados em inibidores de proteases.

Apoio Financeiro e Agradecimentos

