

## Caracterização cinética e docking molecular de peptídeos inibidores de tripsina-like de *Anticarsia gemmatalis*

Assis, J. V. M. G<sup>1</sup>; Oliveira, M. G. A.<sup>1</sup>; Barros, R.A<sup>1</sup>; Oliveira, J. V. A.<sup>1</sup>; Faustino, V. A.<sup>1</sup>; Barbosa, S. L.<sup>1</sup>.

<sup>1</sup>Departamento de Bioquímica e Biologia Molecular, Universidade Federal de Viçosa (UFV), BIOAGRO-UFV, MG, Brazil  
Área temática: Bioquímica. Grande Área: Ciências biológicas e da saúde. Categoria: Pesquisa.

### Introdução

As larvas de *Anticarsia gemmatalis* são as principais pragas desfolhadoras da soja. Os inseticidas inorgânicos, prejudiciais ao meio ambiente e à saúde humana, são as principais moléculas utilizadas no controle dessa praga. Sendo assim, têm-se buscado moléculas orgânicas mais sustentáveis, como os inibidores de proteases, com potencial inseticida. Sabe-se, serino-proteases do tipo tripsina, desempenham a maior parte da proteólise no intestino-médio de *A. gemmatalis*.

### Objetivos

Predizer, *in silico*, os tipos de ligação tripsina-peptídeos e, determinar o modo de inibição e constante inibitória ( $K_i$ ) de GORE1 e GORE2 *in vitro*.

### Material e Métodos



NCBI → Phyre<sup>2</sup> → SwissDock



30 intestinos foram macerados com nitrogênio, diluídos em solução HCl 10<sup>-3</sup>M e injetados à uma coluna HiTrap Benzamidine.

A constante inibitória ( $K_i$ ) foi determinada em Tris-HCl 0.1 mol/L, CaCl<sub>2</sub> 20 mmol/L pH 8.2. Utilizando diferentes concentrações de L-BAPNA e dos peptídeos.

### Resultados e Discussão

Trypsins	$\Delta G_{Binding}$ GORE1	$\Delta G_{Binding}$ GORE2
<i>A. gemmatalis</i> 1	-7.31	-7.65
<i>A. gemmatalis</i> 2	-7.14	-8.23
<i>A. gemmatalis</i> 3	-7.45	-8.41
<i>A. gemmatalis</i> 4	-7.66	-9.26
<i>A. gemmatalis</i> 5	-8.96	-9.87
<i>A. gemmatalis</i> 6	-7.77	-8.63

Tabela 1. Energia-livre de ligação gerada pelo SwissDock entre tripsinas modeladas pelo phyre2 e os peptídeos GORE1 e GORE2.

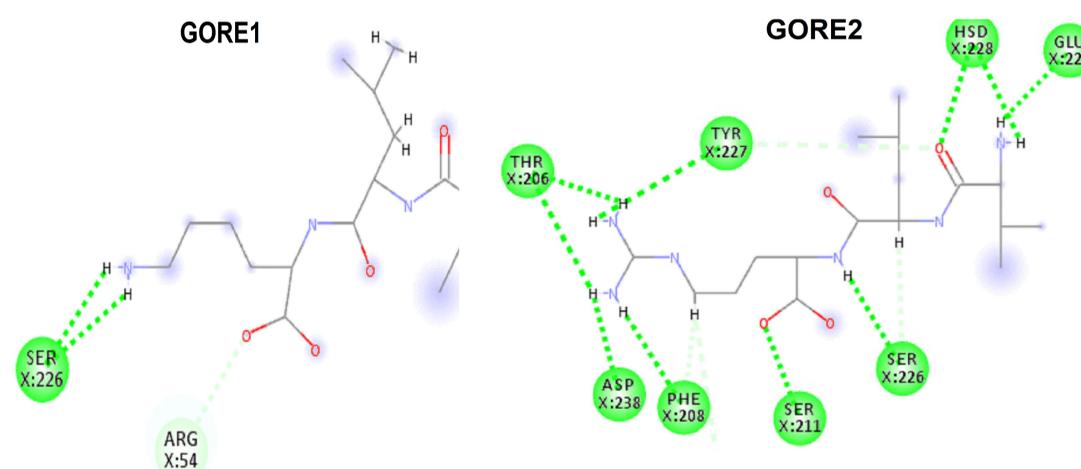


Figura 1. Perfil farmacofórico dos complexos formados entre os peptídeos e os modelos de tripsinas com menor energia de ligação.

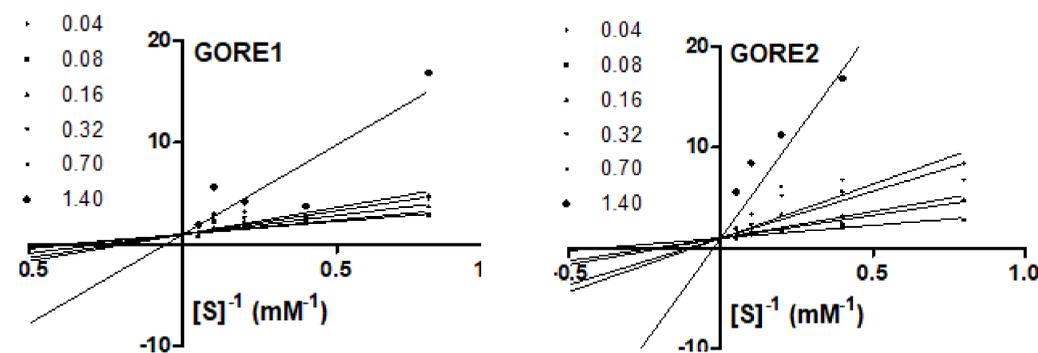


Figura 2. Gráfico de lineaver-burk para determinação do modo de inibição de tripsinas por GORE1 e GORE2.

MODELO DE INIBIÇÃO COMPETITIVA - GraphPad Prisma 5.0 → GORE1 - 0.49mM  
GORE2 - 0.10mM

### Conclusões

Os peptídeos bloqueiam competitivamente o sítio ativo de tripsinas de *A. gemmatalis*. GORE2 é estabilizado por mais interações químicas e apresentou menor  $K_i$ , indicando maior potencial inibitório. Sendo assim, trabalhos futuros podem testar os efeitos desses peptídeos na performance de larvas de *A. gemmatalis*.

### Apoio Financeiro e Agradecimentos

