

Potenciais Alvos Fisiológicos do Óleo Essencial de *Bursera graveolens* em Insetos Praga

Pedro Bento da Silva¹; Eugenio E. Oliveira¹; Luis Viteri^{1,2}; Maria José González³; Jônatas M. Gomes¹; Javier G. Mantilla-Afanador^{1,4}

¹Universidade Federal de Viçosa, Departamento de Entomologia, Viçosa, Minas Gerais, Brasil

²Universidade Federal do Tocantins, Departamento de Biotecnologia, Gurupi, Tocantins, Brasil

³Universidade Federal de Minas Gerais, Departamento de Bioquímica e Imunologia, Belo Horizonte, Minas Gerais, Brasil

^{1,4}Grupo de Pesquisa em Microbiologia e Biotecnologia Agroindustrial, Universidade Católica de Manizales, Colombia.

pedro.b.bento@ufv.br; eugenio@ufv.br; jonatas.gomes@ufv.br; luis.viteri@mail.uft.edu.br; majito130692@gmail.com;

jmantilla@ucm.edu.co

Callosobruchos maculatus, óleos essenciais, docagem molecular

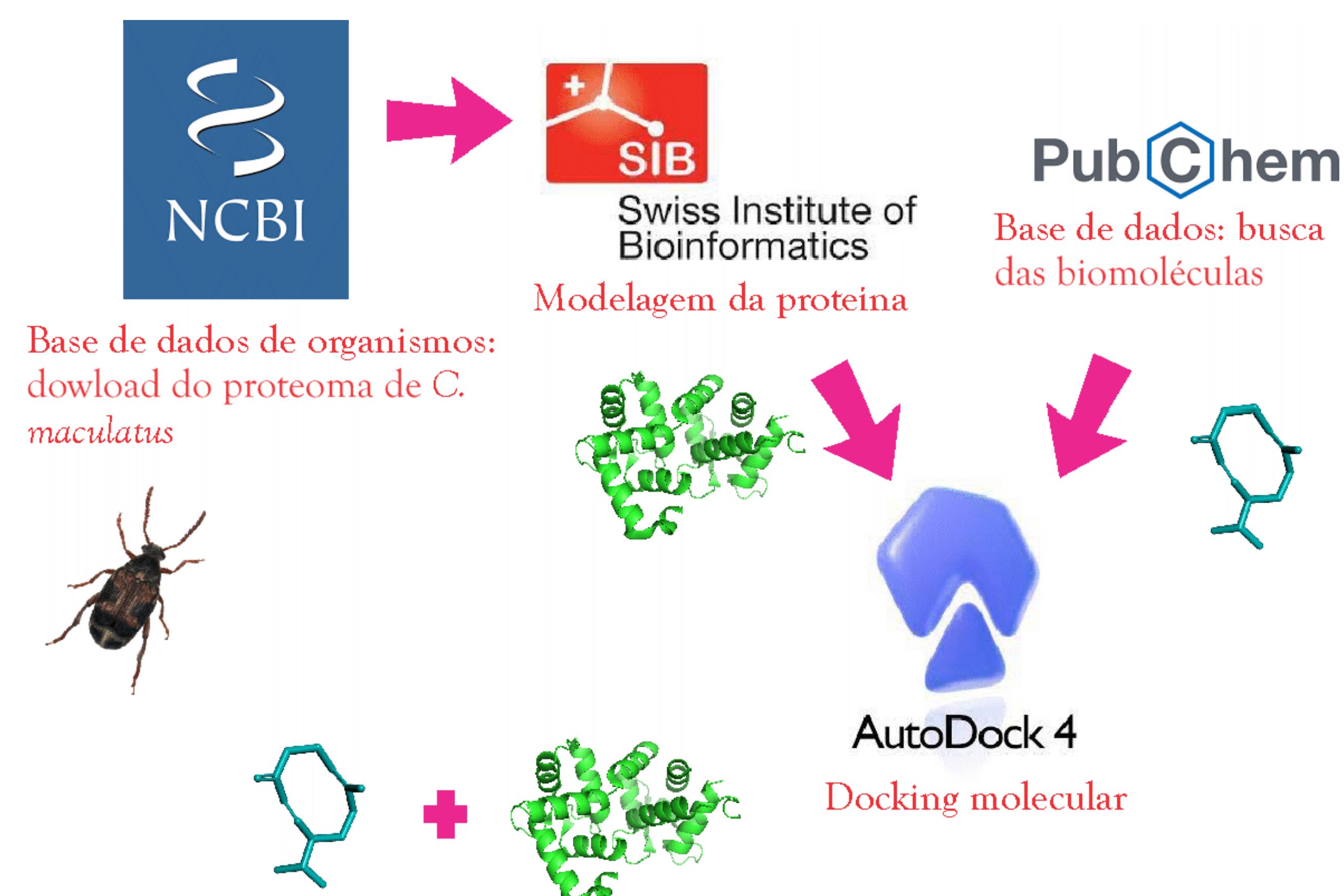
Introdução

No presente estudo utilizamos a docagem molecular para simularmos as interações entre compostos do óleo essencial de *Bursera graveolens* com potenciais alvos fisiológicos de *Callosobruchos maculatus*. As biomoléculas mais promissoras serão as que apresentarem menor valor de energia de afinidade com os receptores de *C. maculatus* em termos de kcal/mol.

Objetivos

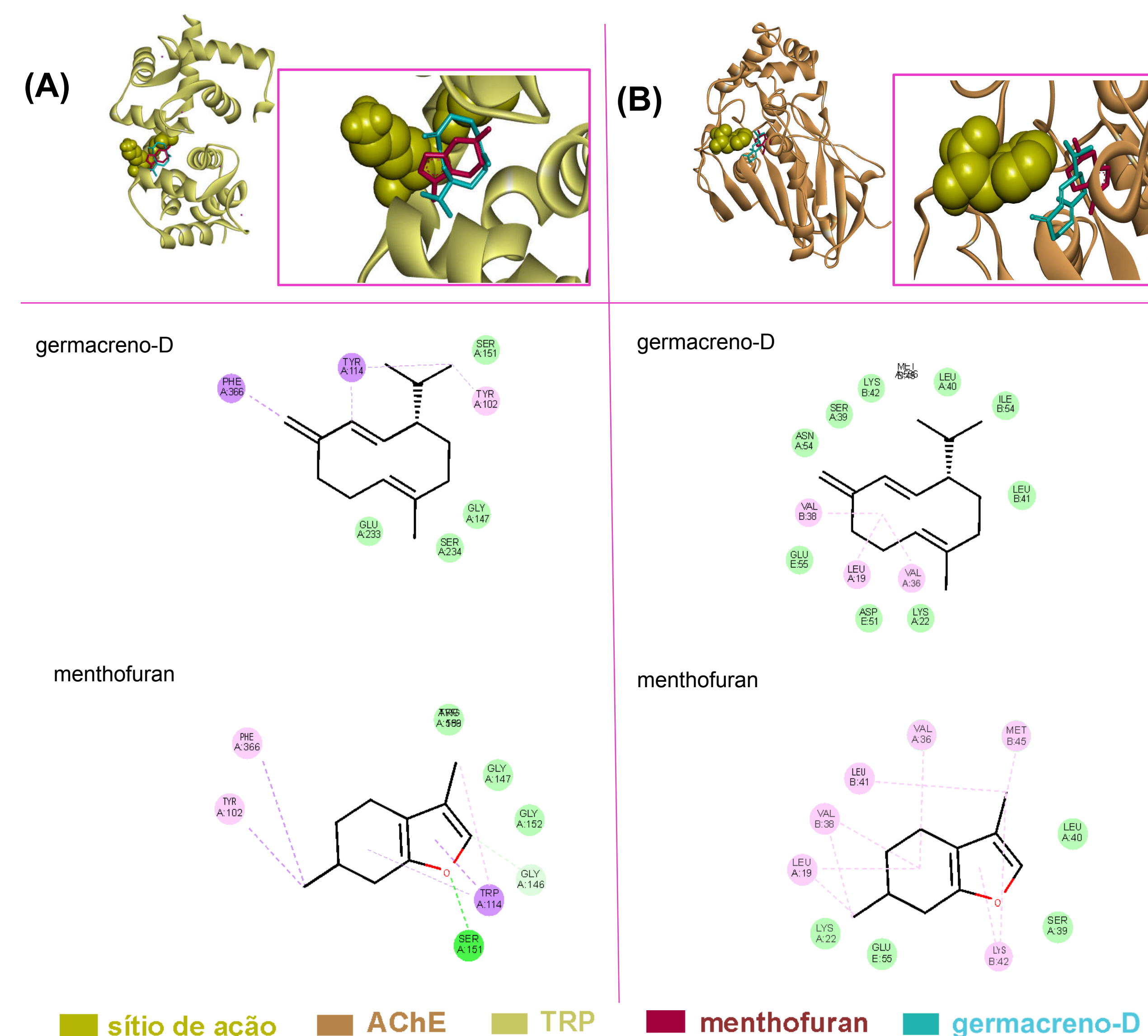
Determinar a docagem molecular para simular as interações moleculares entre as biomoléculas germacreno-D e menthofuran, presentes no óleo essencial de *B. graveolens*, com os possíveis alvos fisiológicos de *C. maculatus*, a enzima acetilcolinesterase (AChE) e a proteína transient receptor potential (TRP)

Material e Métodos



Resultados e Discussão

Germacreno-D, possui maior energia de afinidade com a proteína TRP (A), com valor de -7,1 kcal/mol e AChE (B) -6,8 kcal/mol. De outra parte, menthofuran apresentou energia de afinidade de -6 kcal/mol para os canais TRP (A) e -6 kcal/mol para AChE (B). Abaixo, mapa das interações em 2D.



Conclusões

As simulações de docagem, germecreno-D apresentou maior estabilidade nas interações moleculares com os alvos fisiológicos TRP e AChE. Esses resultados abrem uma visão de possibilidades para testes de toxicidade do óleo essencial de *B. graveolens* no controle do caruncho *C. maculatus*.

Apoio Financeiro



Agradecimentos

