



Simpósio de Integração Acadêmica

“A Transversalidade da Ciência, Tecnologia e Inovações para o Planeta”
SIA UFV Virtual 2021



Análise *in silico* do complexo formado por dois inibidores de protease (BPTI e SKTI) e tripsinas presentes no intestino de *Anticarsia gemmatalis*

João Victor Marques Gonçalves Assis¹; Maria Goreti de Almeida Oliveira¹; Rafael de Almeida Barros¹; Angelo José Rinaldi¹; Rafael Júnior de Andrade¹; Neilier Rodrigues da Silva Junior¹

¹Departamento de Bioquímica e Biologia Molecular, Universidade Federal de Viçosa, Viçosa, Minas Gerais, Brasil

joao.v.goncalves@ufv.br; malmeida@ufv.br; rafaelagroufv2011@gmail.com; angelo.rinaldi@ufv.br; rafael.j.andrade@ufv.br; neilier.junior@ufv.br

Bioquímica - Ciências Agrárias/ Pesquisa

palavras chave: inibidor de tripsina pancreática bovina, Inibidor de tripsina Kunitz de soja, Bioinformática

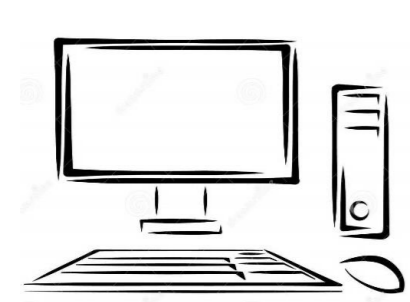
Introdução

As abordagens de manejo de pragas são constantemente desafiadas por herbívoros resistentes e problemas relacionados à saúde e ao meio ambiente. Na verdade, o maior desafio para a agricultura moderna é proteger as safras de pragas e ainda manter a qualidade ambiental. Assim, novas moléculas, com diferentes modos de ação, têm sido buscadas e avaliadas a fim de complementar, ou mesmo substituir, os atuais produtos químicos utilizados no manejo de pragas. Inibidores de proteases afetam a digestão proteolítica de insetos, afetando a disponibilidade de aminoácidos livres para o desenvolvimento e reprodução

Objetivos

Avaliar o potencial inibitório das proteínas BPTI (inibidor de tripsina pancreática bovina) e SKTI (inibidor de tripsina Kunitz de soja) sobre as enzimas tripsina de *A. gemmatalis in silico*.

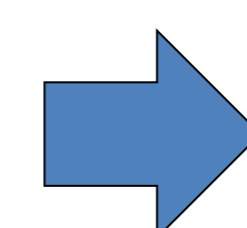
Material e Métodos



Seis isoformas das tripsinas foram identificadas em trabalhos anteriores

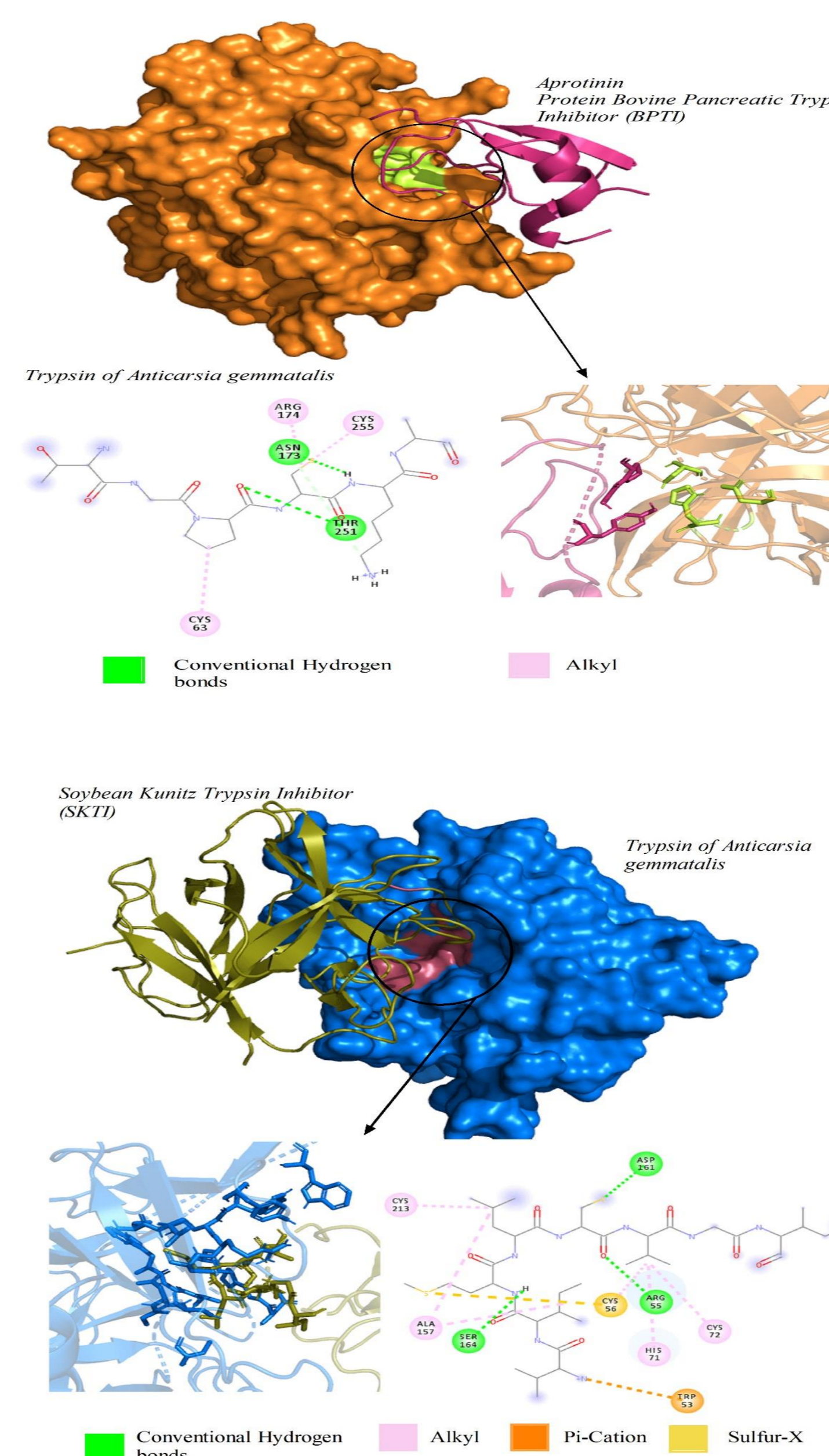


As estruturas cristalinas de BPTI e SKTI foram obtidas através do PDB, 3LDJ e 1AVX, respectivamente.



Então foram feitas simulações de dinâmica molecular e docking através do CLUSPRO.

Resultados e Discussão



No topo: Visão geral da melhor posição de acoplamento da ligação do inibidor pancreático bovino (BPTI) com a tripsina digestiva *Anticarsia gemmatalis*. Formato da superfície representando a tripsina em laranja e o BPTI em roxo. No canto inferior direito: aminoácidos catalíticos em bastões verdes e os resíduos reativos do inibidor em bastões roxos envolvidos na interação tripsina-BPTI. No canto inferior esquerdo: perfil farmacofórico do complexo BPTI-tripsina após docking molecular. Bola colorida e linha pontilhada indicam o tipo de interação entre a sequência reativa BPTI e os resíduos.

No topo: Visão geral da melhor posição de acoplamento da ligação do inibidor de tripsina Kunitz de soja (SKTI) com a tripsina digestiva *Anticarsia gemmatalis*. Formato da superfície representando a tripsina em azul e o SKTI em verde. No canto inferior esquerdo: aminoácidos da enzima em bastões azuis e os resíduos reativos do inibidor em bastões verdes envolvidos na interação tripsina-SKTI. No canto inferior direito: perfil farmacofórico do complexo SKTI-tripsina após docking molecular. Bola colorida e linha pontilhada indicam o tipo de interação entre a sequência reativa de SKTI e os resíduos da cadeia lateral de tripsina.

Conclusões

A análise de energia via *docking* e experimentos de dinâmica molecular destacaram este segmento de alta afinidade no BPTI (YGGCRA), onde cada um dos resíduos de aminoácidos teve uma contribuição energética diferente na formação do complexo, entrando no conceito de *hot-spots* para Complexo BPTI-tripsina e candidatos dignos para peptídeos inibidores, ou pelo menos pistas promissoras para projetar pequenas moléculas inibitórias e peptídeos com afinidade, estabilidade e biodisponibilidade aumentadas.

Apoio Financeiro



Agradecimentos

