DINÂMICA MOLECULAR DE UMA PROTEÍNA ESPECÍFICA DO ÁCARO TETRANYCHUS URTICAE (ACARI: TETRANYCHIDAE) VISANDO O DESENVOLVIMENTO DE UM BIOACARICIDA

II InovaBiotec - Congresso de Inovação e Biotecnologia, 2ª edição, de 14/07/2021 a 17/07/2021
ISBN dos Anais: 978-65-89908-41-8

RUFFATTO; Kettlin [1], SILVA; Camila Rockenbach da [2], TIMMERS; Luis Fernando Saraiva Macedo [3], SPEROTTO; Raul Antonio [4]

RESUMO

A soja (*Glycine max* (L.) Merril) é uma das culturas mais importantes para o Brasil. Entretanto, vem sofrendo com infestações de ácaros. Atualmente, a principal espécie de ácaro que afeta a produção de soja é *Tetranychus urticae* Koch, capaz de desenvolver resistência aos acaricidas químicos. Tendo em vista o alto impacto dessa praga para as culturas, torna-se necessária a busca por alternativas que minimizem a propagação. Dentre as diferentes metodologias, a bioinformática pode ser empregada na identificação de proteínas potenciais para o desenvolvimento de acaricidas. Este trabalho teve como objetivo identificar pequenas moléculas (potenciais inibidores) capazes de se ligar a uma proteína específica do ácaro. A primeira etapa do trabalho foi a identificação das proteínas específicas de ácaros, através da genômica comparativa, onde foram analisados os genomas de quatro organismos (*T. urticae*, *G. max*, *Homo sapiens* e *Apis mellifera*). A partir da comparação, foram encontradas 6.224 proteínas específicas de *T. urticae*, que posteriormente foram comparadas com sequências depositadas no Banco de Dados de Proteínas (PDB) para verificar a existência de estruturas similares determinadas experimentalmente. Identificamos apenas uma proteína de *T. urticae* com estrutura determinada experimentalmente. Com as informações do sítio ativo e substrato, foram feitas buscas em dois bancos de dados de compostos naturais (*Supernatural* e NuBBe), sendo avaliadas 4.672 pequenas moléculas. Os compostos selecionados foram utilizados para experimentos de *docking* molecular, que consiste em prever a posição, orientação e afinidade de um composto no sítio ativo de uma proteína alvo. Os cinco melhores compostos de cada banco de dados foram selecionados para a realização das simulações por dinâmica molecular, que está atualmente em andamento, e visa avaliar a estabilidade das moléculas identificadas pelo *docking molecular*, no sítio ativo da proteína alvo. Os compostos que apresentarem melhores

[1] Programa de Pós-Graduação em Biotecnologia - PPGBiotec - Universidade do Vale do Taquari - Univates - Lajeado - RS, kruffatto@universo.univates.br
[2] Programa de Pós-Graduação em Biotecnologia - PPGBiotec - Universidade do Vale do Taquari - Univates - Lajeado - RS, camila.silva5@universo.univates.br
[3] Programa de Pós-Graduação em Biotecnologia - PPGBiotec - Universidade do Vale do Taquari - Univates - Lajeado - RS, luis.timmers@univates.br
[4] Programa de Pós-Graduação em Biotecnologia - PPGBiotec - Universidade do Vale do Taquari - Univates - Lajeado - RS, rasperotto@univates.br

resultados serão selecionados para os testes de toxicidade em *T. urticae* e soja.

PALAVRAS-CHAVE: Soja, Acaricida, Bioinformática, Tetranychus urticae

[1] Programa de Pós-Graduação em Biotecnologia - PPGBiotec - Universidade do Vale do Taquari - Univates - Lajeado - RS, kruffatto@universo.univates.br
[2] Programa de Pós-Graduação em Biotecnologia - PPGBiotec - Universidade do Vale do Taquari - Univates - Lajeado - RS, camila.silva5@universo.univates.br
[3] Programa de Pós-Graduação em Biotecnologia - PPGBiotec - Universidade do Vale do Taquari - Univates - Lajeado - RS, luis.timmers@univates.br
[4] Programa de Pós-Graduação em Biotecnologia - PPGBiotec - Universidade do Vale do Taquari - Univates - Lajeado - RS, rasperotto@univates.br