

IDENTIFICAÇÃO *IN SILICO* DE SEMIOQUÍMICOS COMPORTAMENTALMENTE ATIVOS EM DUAS ESPÉCIES DE AFÍDEOS: *MEGOURA VICIAE* E *NASONOVIA RIBISNIGRI*

Mariane da Silva Barboza¹; José William Ferreira da Silva²; Renato César da Silva³

¹ Instituto Federal do Sertão Pernambucano/Campus Ouricuri, mariane.barboa.31@gmail.com

² Instituto Federal do Sertão Pernambucano/Campus Ouricuri, williamfsilva0@gmail.com

³ Instituto Federal do Sertão Pernambucano/Campus Ouricuri, renato.cesar@ifsertao-pe.edu.br

A interação entre os insetos ocorre de maneira singular, restrita à emissão e assimilação de substâncias químicas, denominadas de semioquímicos. Essas substâncias, mais especificamente moléculas odoríferas fisiologicamente relevantes em insetos é de suma importância para a agricultura, como em estratégias relacionadas ao Manejo Integrado de Pragas (MIP). Os pulgões (afídeos), conhecidos popularmente como piolho-das-plantas representam sérias espécies de pragas para a agricultura, se alimentando da seiva de plantas. Particularmente, *Nasonovia ribisnigri* e *Megoura viciae* são afídeos presentes nas culturas da alface e da ervilhaça, respectivamente. Com o intuito de compreender e propor mecanismos de ação para a detecção e liberação de odor nas duas espécies mencionadas importantes na agricultura, este trabalho estruturou-se em métodos teóricos-computacionais, com a utilização de servidores, como o Pherobase, para a busca de semioquímicos e o PDB (*Protein Data Bank*) para a aquisição das proteínas de ligação a odorantes (*OBP*) já obtidas experimentalmente e disponíveis na literatura: MVic OBP3 4z39 e Nrib OBP3 4z45. Softwares como Avogadro, ChemSketch e Discovery Studio foram utilizados para desenho e otimização das moléculas e o MOPAC, nos cálculos de propriedades químico-quânticas dos semioquímicos. E para o docking molecular, foi utilizado o AutoDockVina. As OBPs demonstraram bons números de sítios de ligação, onde a MVic OBP3 apresentou três sítios e a Nrib OBP3, cinco. Dentre os ligantes, α -gurgunene, por exemplo, apresentou menor afinidade eletrônica: $-1.452 \text{ KJ mol}^{-1}$. Com o docking, este ligante foi o que também apresentou melhor afinidade com MVic OBP3, $-5,9 \text{ KJ mol}^{-1}$, indicando maior estabilidade do sistema frente aos demais semioquímicos. Resultados como estes dão margens a estudos mais amplos voltados à interação inseto-odorante, quiçá para métodos alternativos de controle de pragas agrícolas.

Palavras-chave: semioquímico; OBPs; insetos; docking molecular.

Agradecimentos: IF Sertão-PE.