

AValiação de Métodos de Triagem Virtual de Inibidores para Estrutura 3D da Quitinase de *Moniliophthora perniciosa*

Geovane Silva de Araújo^{*}

Catiane Sacramento de Souza^{****}

José Jorge Silva Junior^{***}

O *Moniliophthoraperniciosa* (Stahel) Aime & Phillips-Mora 2006 é o fungo causador da patologia popularmente conhecida como vassoura de bruxa que provoca perdas drásticas na cultura do cacau no sul da Bahia, Brasil. Muitas pesquisas ainda estão sendo direcionadas para combater a *M. perniciosa*, para desenvolver fungicidas eficientes para erradicar a doença. A estratégia utilizada é possivelmente a destruição da parede celular, composta por quitina, um componente importante para a parede celular de fungos e insetos. O objetivo deste estudo a partir da estrutura tridimensional da quitinase (EC 3.2.1.14), uma enzima que atua na degradação da quitina, a busca foi feita através de triagem virtual de compostos que têm potencial para inibir quitinase, proporcionando uma alternativa à interrupção para esta via metabólica essencial para o desenvolvimento do fungo. Para a Seleção dos inibidores foi criada uma base de dados com compostos que possuem um forte potencial para ser inibidor da quitinase. Assim, utilizou-se 5 Ligantes citados Como inibidores, e partindo destes, uma base de dados foi criada com estruturas similares avaliadas pelo banco de dados de substâncias disponíveis comercialmente pelo Zinc¹², compondo 96 Possíveis Estruturas. A Seleção dos potenciais Ligantes foi feita pelo AutoDock Vina utilizando a Plataforma PYRX Python 0.8 e foram selecionados de acordo com seus valores de energia de afinidade, RMSD e número de interação ligante-proteína. Estes grupos de compostos estão sendo avaliados de acordo com sua energia potencia de inibição. Algumas destas moléculas são substâncias naturais e estão disponíveis no NatProBD, um banco de dados com substâncias extraídas do semiárido baiano, o que dá a possibilidade de extração desses compostos ativos para possíveis testes.

Palavras-chave: quitinase, inibidores, triagem virtual, química computacional, substância naturais.

* Graduando em Farmácia na Faculdade Maria Milza. geovannearaujo@gmail.com geovanefarma@hotmail.com

**** Doutora em Biotecnologia UEFS/FIOCRUZ. Professora da Faculdade Maria Milza casouza2010@yahoo.com.br ; catianess@gmail.com

*** Mestre em Biotecnologia - UEFS/CPqGM-FIOCRUZ. Professor da Faculdade Maria milza.jj_farma@yahoo.com.br