

XIII CONGRESSO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UNIVERSIDADE FEDERAL DE CAMPINA GRANDE



16,17 e 18 de novembro de 2016

Campina Grande, Paraíba, Brasil

MODELAGEM E DOCKING MOLECULAR DA GLUTATIONA S-TRANSFERASE EPSILON 2 DE *Aedes Aegypti*: POSSÍVEIS IMPLICAÇÕES NA RESISTÊNCIA A INSETICIDAS QUÍMICOS

Izabela Cristina Pereira Campos¹, Rafael Trindade Maia²

RESUMO

As glutaciona S-transferases constituem uma superfamília de enzimas responsáveis por reações de desintoxicação celular. Na classe epsilon desta superfamília, a AaGSTE2 tem sido associado a resistência a inseticidas químicos em mosquitos, como no *Aedes aegypti*. Considerando-se que a função de uma enzima está intimamente relacionada a sua estrutura tridimensional, métodos de modelagem por homologia tem sido aplicado no estudo de elucidação de proteínas. Assim, tendo em vista que esta enzima ainda não tinha sua estrutura elucidada, o projeto teve por objetivo construir um modelo para esta enzima, através do uso de técnica computacional, usando o método de modelagem por homologia. O modelo foi validado pelo software Swiss model e simulações de docking foram realizados com os compostos DDT, Carbaril e CDNB contra a GST, no programa AUTODOCK 1.5.6. Os resultados da modelagem e simulações de docking se mostraram significativos. Assim, conclui-se que o uso da metodologia aplicada na pesquisa, poderá servir para estudos futuros, na elucidação de estruturas. Além de possíveis estudos com a enzima construída.

Palavras-chave: GST, Análise *in silico*, Resistência a inseticidas

¹Graduanda em Engenharia de Biotecnologia e Bioprocessos, Unidade de Engenharia de Biotecnologia e Bioprocessos, UFCA, Campina Grande, PB, e-mail: izapcampos@gmail.com

²-UFCA, Doutor, Unidade Acadêmica de Educação do Campo, UFCA, Campina Grande, PB, e-mail: rafael.rafatrin@gmail.com

XIII CONGRESSO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UNIVERSIDADE FEDERAL DE CAMPINA GRANDE



16,17 e 18 de novembro de 2016

Campina Grande, Paraíba, Brasil

MODELAGEM E DOCKING MOLECULAR DA GLUTATIONA S-TRANSFERASE EPSILON 2 DE *Aedes Aegypti*: POSSÍVEIS IMPLICAÇÕES NA RESISTÊNCIA A INSETICIDAS QUÍMICOS

Izabela Cristina Pereira Campos¹, Rafael Trindade Maia²

ABSTRACT

The glutathione S-transferases are a superfamily of enzymes responsible for cellular detoxification reactions. In epsilon class of this superfamily, the AaGST2 has been associated with resistance to chemical insecticides in mosquitoes such as *Aedes aegypti*. Considering that the function of an enzyme is closely related to its three dimensional structure, homology modeling methods have been applied to the study of elucidation of protein. Thus, considering that this enzyme has not yet had its structure elucidated, the project aimed to build a model for this enzyme using the homology modeling method. The model was validated by the Swiss Model software and docking simulations were performed with the compounds DDT, Carbaryl and CDNB against GST in AutoDock program 1.5.6. The results of modeling and docking simulations were significant. Thus, it is concluded that this methodology can be used for future studies to elucidate structures. Also, in studies of possible with the built enzyme.

Keywords: GST, Insecticide Resistance, In Silico Analysis