



COMPORTAMENTALMENTE ATIVOS EM DUAS ESPÉCIES DE AFÍDEOS: *MEGOURA VICIAE* E *NASONOVIA RIBISNIGRI*

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

1- Instituto Federal do Sertão Pernambucano/Campus Ouricuri - E-mail para contato: mariane.barboza.31@gmail.com; 2- Instituto Federal do Sertão Pernambucano/Campus Ouricuri - E-mail para contato: williamfsilva0@gmail.com; 3- Instituto Federal do Sertão Pernambucano/Campus Ouricuri - E-mail para contato: renato.cesar@ifsertao-pe.edu.br

RESUMO

Introdução: A interação entre os insetos ocorre através da emissão e assimilação de substâncias químicas, denominadas de semioquímicos. Essas substâncias, mais especificamente as moléculas odoríferas, são importantes para a agricultura, como em estratégias relacionadas ao Manejo Integrado de Pragas (MIP). Os afídeos, conhecidos como piolho-das-plantas, *Nasonovia ribisnigri* e *Megoura viciae* representam espécies de pragas agrícolas que se alimentam da seiva da alface e da ervilhaça, respectivamente. **Objetivo:** Dessa forma, o objetivo do presente trabalho consiste em compreender e propor mecanismos de ação para a detecção e liberação de odor nas duas espécies mencionadas importantes na agricultura. **Materiais e Métodos:** Métodos teóricos-computacionais foram aplicados para a estruturação do trabalho. Utilizou-se os servidores Pherobase para a busca de semioquímicos e o PDB para a aquisição das OBP 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 os dockings moleculares, foi utilizado o AutoDockVina. **Resultados:** 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 os dockings, este ligante foi o que também apresentou melhores afinidades: $-5,9 \text{ Kcal/mol}$, com MVicOBP3, e para NribOBP3, $-6,8 \text{ Kcal/mol}$, indicando maiores estabilidades dos sistemas frente aos demais semioquímicos. **Considerações Finais:** As OBPs demonstraram bons números de sítios de ligação, e com base nos resultados obtidos, estes deram margens a estudos mais amplos voltados à interação inseto-odorante e a métodos alternativos de controle de pragas agrícolas.

Palavras-chave: Semioquímico; OBPs; Insetos; Docking molecular

AGRADECIMENTOS: IF Sertão-PE

Modalidade: PIVIC
Campus: Ouricuri