

Eduardo S. Cedraz Oliveira^{1*}, Moyses Fagundes de Araujo Neto¹.

¹Centro Universitário de Excelência (UNEX), Feira de Santana-BA.

*educedraz139@gmail.com.

INTRODUÇÃO

O *Aedes aegypti* foi responsável pela transmissão de quase 1,8 milhão de casos de arboviroses e cerca de 2.000 óbitos em 2025.

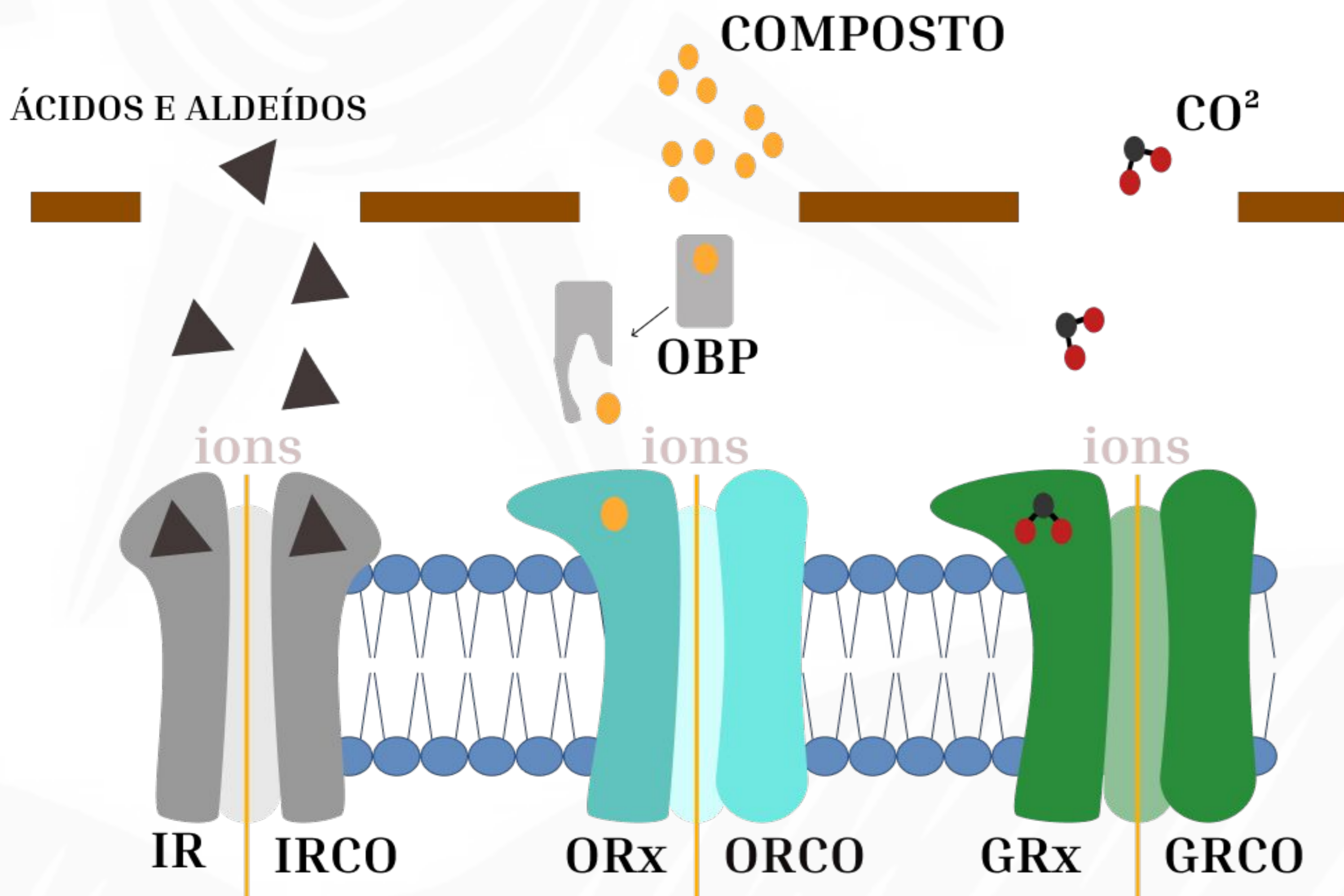
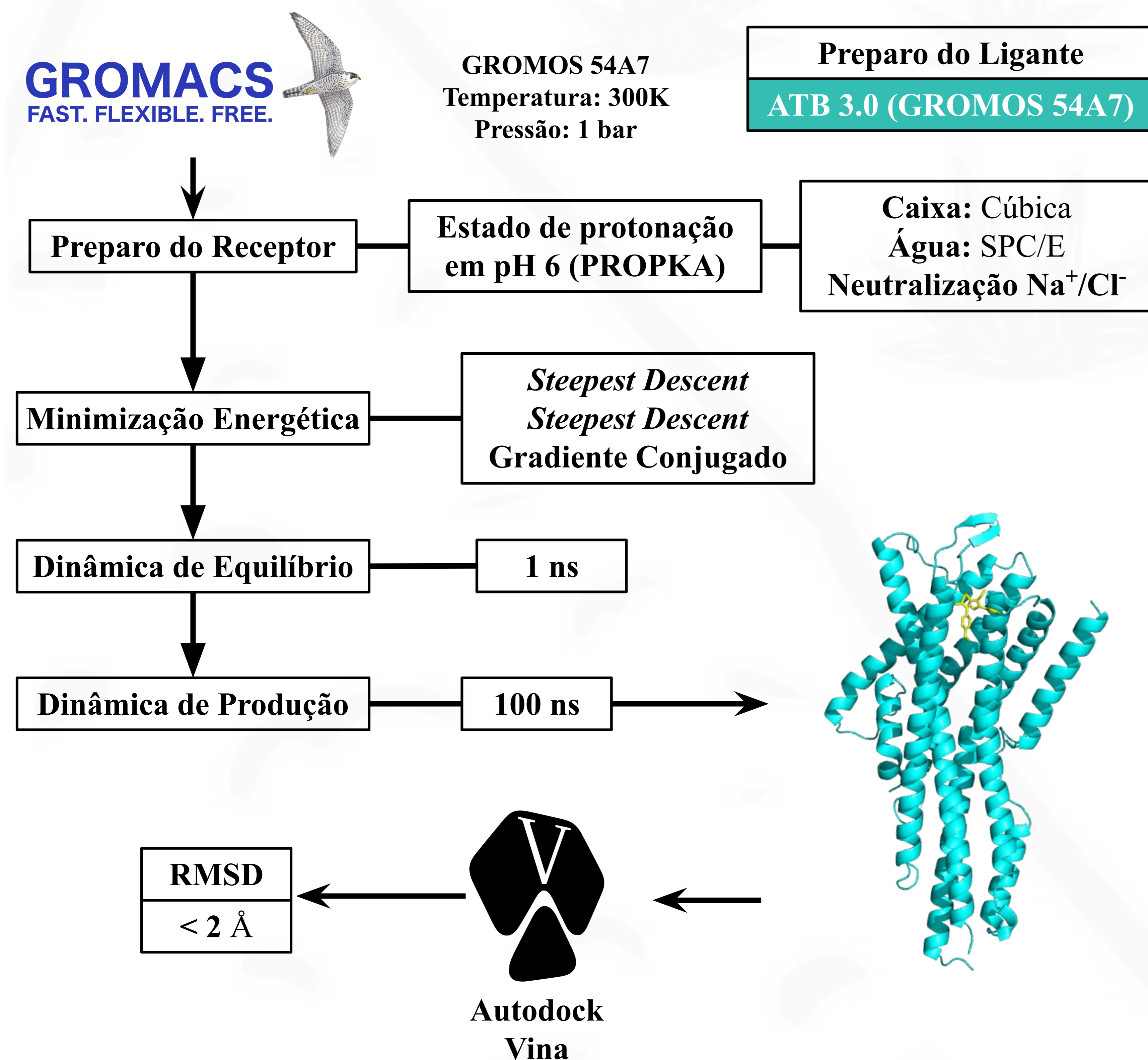


Figura 1 - Esboço esquemático da sinalização via receptores olfativos (OR), ionotrópicos (IR) e gustativos (GR) em insetos. Adaptado de Xiong et al., 2025.

OBJETIVO

Avaliar por metodologias *in silico* a estabilidade do complexo ORCO-VUAA1 (PDB 8V02).

METODOLOGIA



RESULTADO E DISCUSSÃO

Figura 2 - RMSD da forma APO (preto; RMSD = 0,3727) e complexo (vermelho; RMSD = 0,3855)

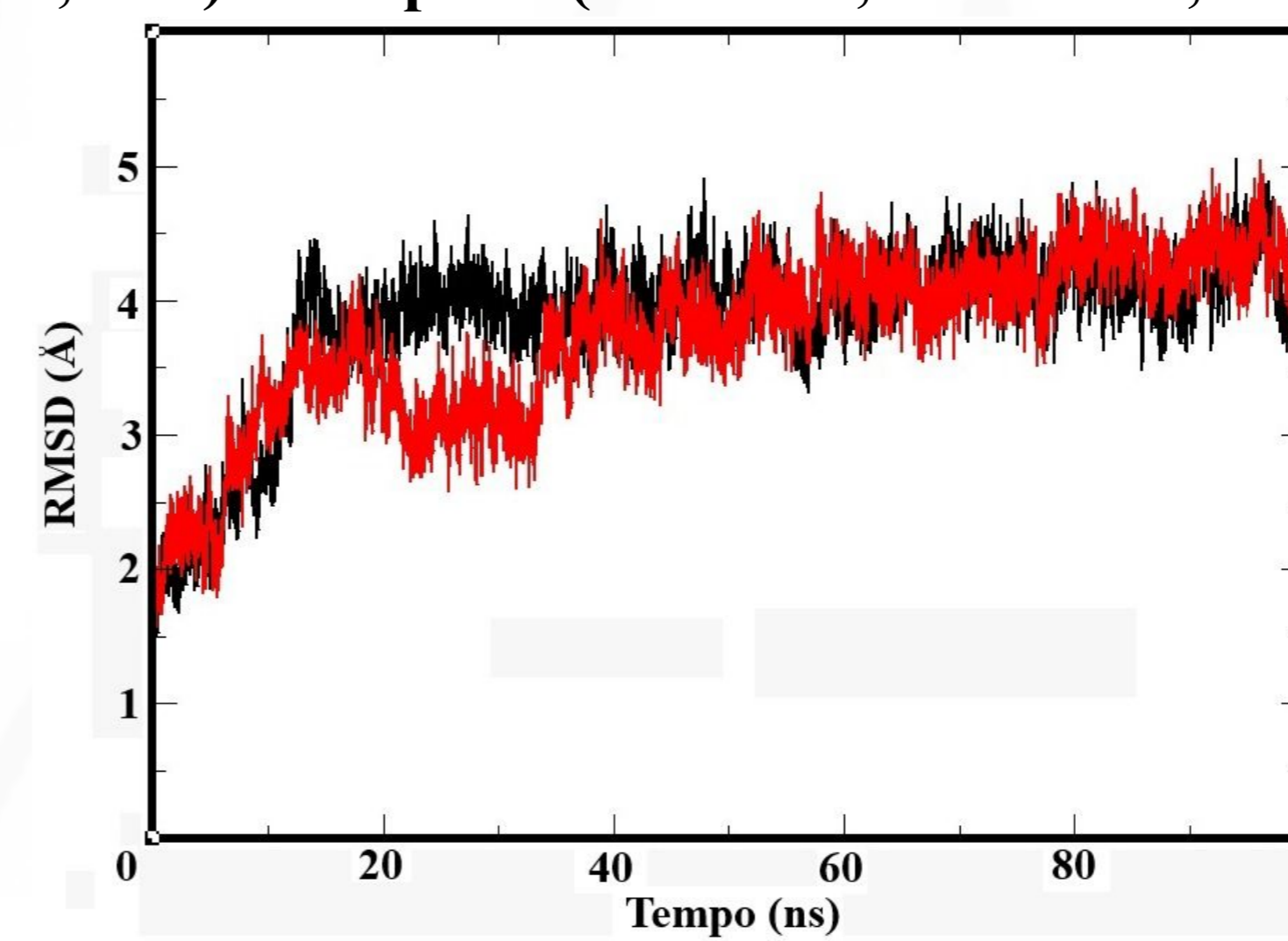
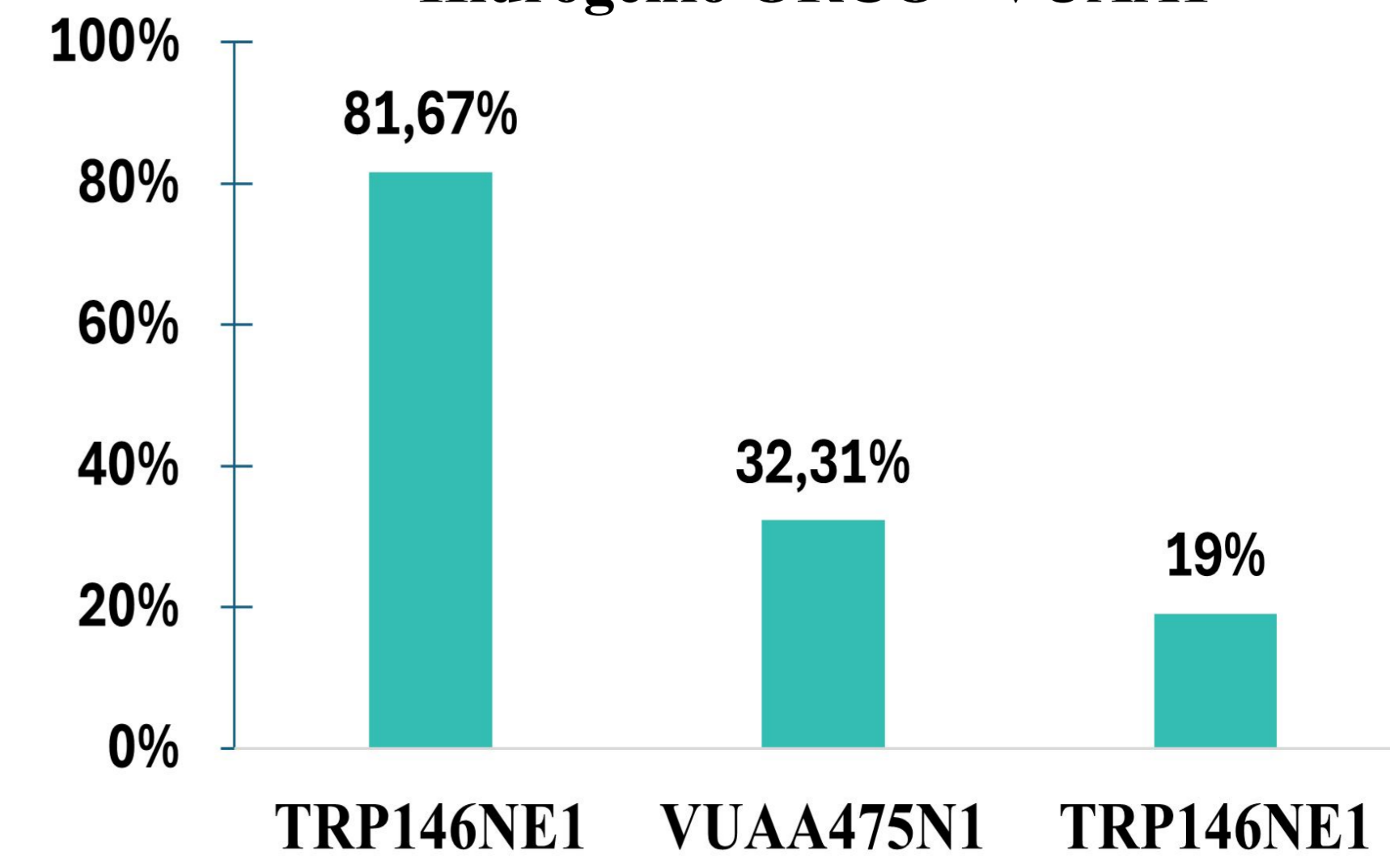


Figura 3 - Ocupação Ligação de Hidrogênio ORCO - VUAA1



Componentes termodinâmicas (Kcal/mol)

Composto	Evdw	Eelec	EMM	Gpol	Gapolar	ΔG
VUAA1	-52,63	-9,59	-62,23	23,64	-5,48	-44,06

Componentes calculados utilizando g_mmpbsa. EvdW = Energia de van der Waals; Eelec = Energia eletrostática; EMM = Energia potencial; Gpol = Energia polar de solvatação; Gapolar = Energia apolar de solvatação; ΔG = Energia livre.

Figura 4 - Matriz dos clusters da DM (cutoff=0.15)

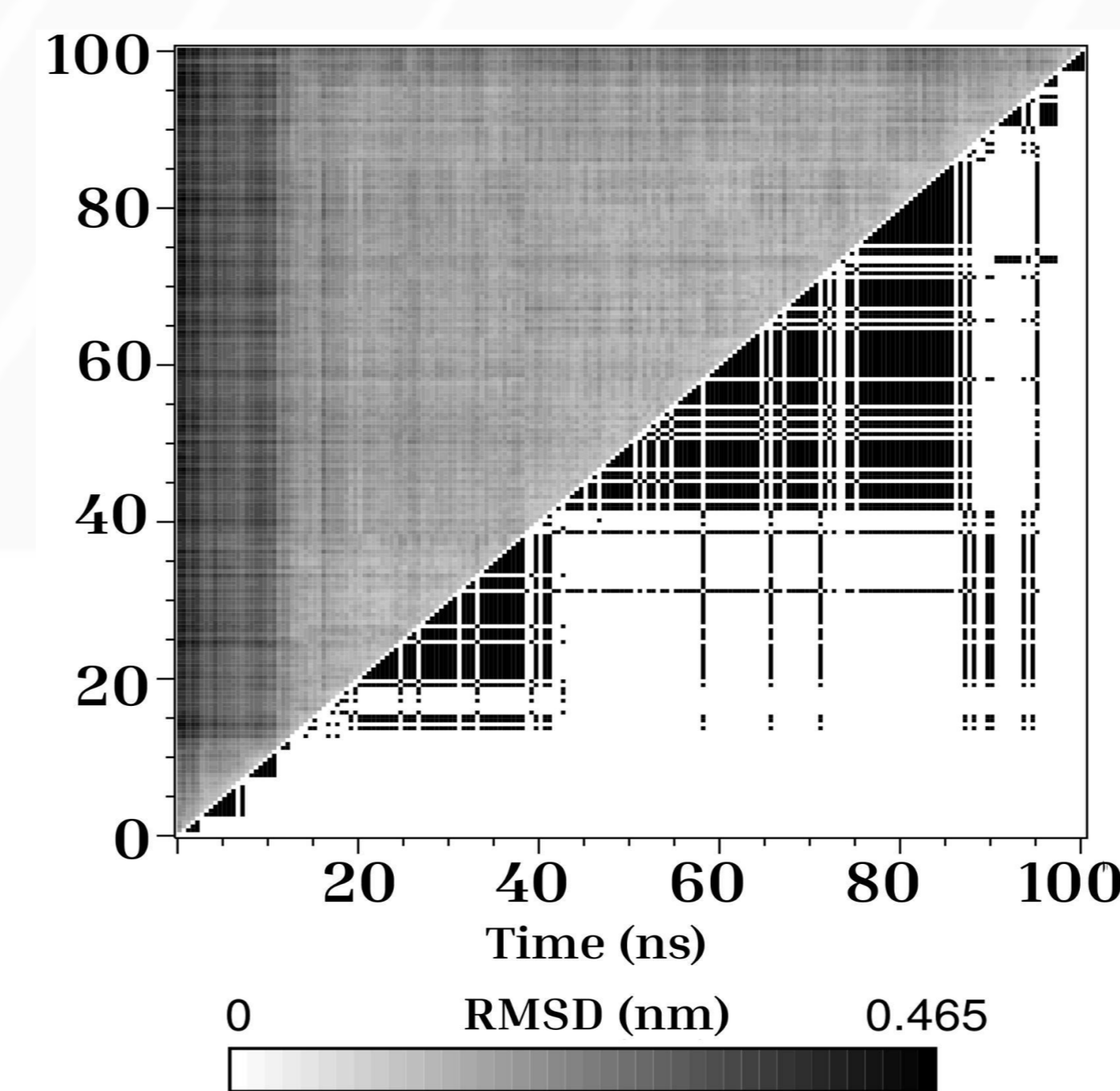


Figura 5 - Mapa de interação da pose representativa da DM (cluster=6300)

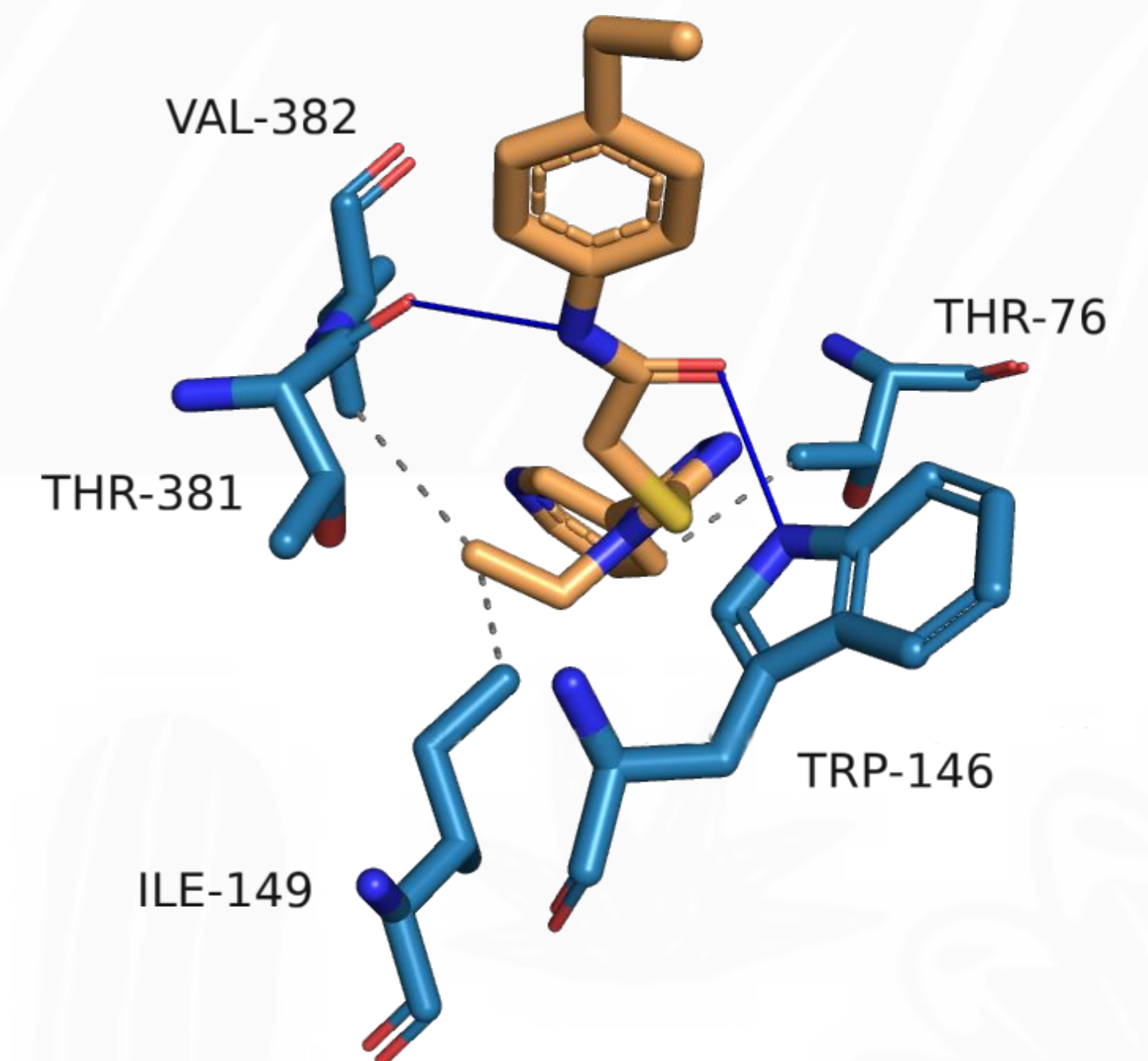


Figura 6 - Mapa de interação do acoplamento molecular

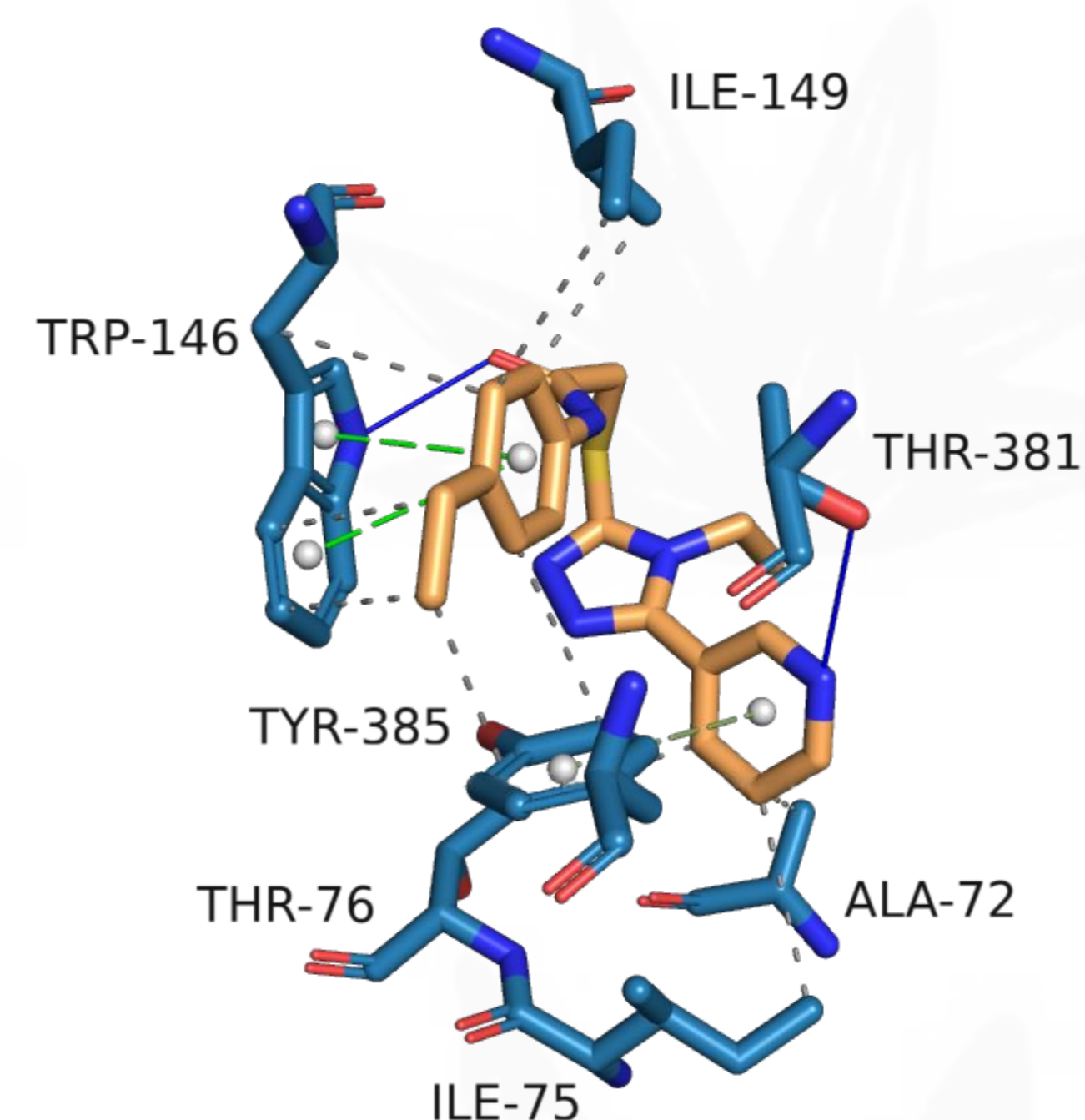
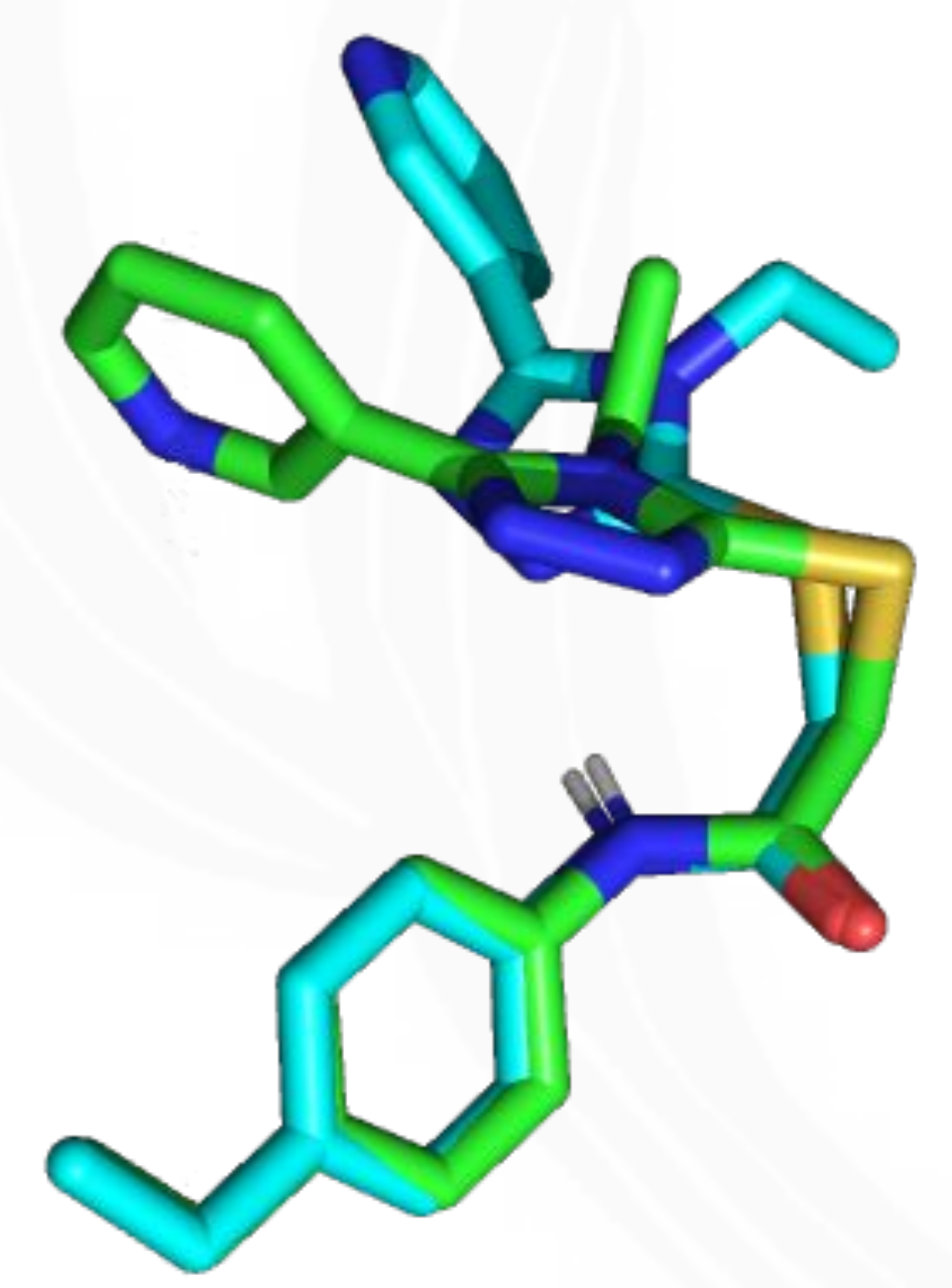


Figura 7 - Sobreposição do vuaa1 frente a pose gerada pelo Autodock vina (rmsd = 1,854)



CONCLUSÃO

A estabilidade do complexo ORCO-VUAA1 avaliada através da Dinâmica Molecular foi capaz de selecionar uma estrutura representativa para utilização em futuras triagens por acoplamento molecular utilizando o programa Autodock Vina (RMSD = 1,854).

REFERÊNCIAS

- BAKER, N. A. et al. *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.*, v. 98, n. 17, p. 10037-10041, 2001.
- BRASIL. Ministério da Saúde. **Painel de Monitoramento de Arboviroses**, 2025.
- KUMARI, R. et al. *J. Chem. Inf. Model.*, v. 54, n. 7, p. 1951-1962, 2014.
- MALDE, A. K. et al. *J. Chem. Theory Comput.*, v. 7, n. 12, p. 4026-4037, 2011.
- OLSSON, M. H. M. et al. *J. Chem. Theory Comput.*, v. 7, n. 2, p. 525-537, 2011.
- SCHRÖDINGER, LLC. *The PyMOL Molecular Graphics System*, Version 2.0, 2015.
- TROTT, O.; OLSON, A. J. *J. Comput. Chem.*, v. 31, n. 2, p. 455-461, 2010.
- TURNER, P. J. *XMGRACE*, Version 5.1.25, 2024.
- XIONG, S. et al. *Parasites & Vectors*, v. 18, n. 1, p. 324, 2025.