

INVESTIGAÇÃO IN SILICO POR INIBIDORES DE RECEPTOR ABC EM CANDIDATUS LIBERIBACTER AMERICANUS: UMA ABORDAGEM COMPUTACIONAL PARA O CONTROLE DE HUANGLONGBING EM CITROS

V Seminário de Pesquisa, Inovação e Pós-Graduação da Universidade Federal de Uberlândia (Iniciação Científica), 1ª edição, de 04/11/2025 a 13/11/2025
ISBN dos Anais: 978-65-5465-171-4

MESQUITA; Yasmim Nunes ¹

RESUMO

Huanglongbing é uma das doenças mais prejudiciais para a citricultura global, causada por bactérias do gênero *Candidatus Liberibacter spp.*, transmitidas principalmente pelo psílido *Diaphorina citri*. Sua proliferação é descontrolada e gera impactos sociais, econômicos e ambientais severos, destacando o Brasil, que é um dos maiores produtores de citros no mundo. Além disso, não existe a possibilidade de cultivar esses microrganismos em laboratório, assim, a bioinformática surge como alternativa para encontrar possíveis inibidores para o transportador ABC, um receptor é crucial para que o patógeno sobreviva. Para isso, adotou-se uma metodologia computacional, combinando os métodos *in silico* como: triagem virtual, *docking* molecular e dinâmica molecular. Primeiramente, obteve-se o modelo estrutural do transportador ABC de *Candidatus Liberibacter asiaticus* no Protein Data Bank (PDB: 8GU1) e foi usado como base para obter o modelo por homologia do transportador ABC de *Candidatus Liberibacter americanus*, gerado pelo site *Swiss-Model*. Em seguida, utilizou-se o *Molecular Operating Environment* (MOE) para a criação do modelo baseado em forma. Ele foi aplicado na triagem virtual (realizado pelo vROCS) de duas bibliotecas de compostos: NuBBE e MolPort. Os compostos com melhores *scores* de cada biblioteca foram submetidos ao *docking* molecular no programa MOE. As cinco melhores moléculas das duas bibliotecas foram submetidas às análises 2D, farmacocinética e dinâmica molecular. Os resultados mostram que a abordagem computacional pode identificar compostos promissores para inibição dos transportadores ABC de *Candidatus Liberibacter spp.* Essas estratégias para o manejo dessa doença são cruciais para garantir a sustentabilidade da produção cítrica no Brasil e no mundo.

PALAVRAS-CHAVE: Huanglongbing, Transportadores ABC, Docking, Bioinformática, Citros

¹ Instituto de Biotecnologia (IBTEC), Universidade Federal de Uberlândia (UFU), yasmim.mesquita@ufu.br