



DESENVOLVIMENTO DE INIBIDORES DA QUITINA SINTASE DE *Aedes aegypti* BASEADOS EM DEFENSINAS DE PLANTAS

Damarees Rodrigues Silva¹, Bruno Medeiros Roldão de Araújo²

RESUMO

O *Aedes aegypti* é um dos principais vetores de arboviroses que vem causando transtornos à saúde das populações residentes nas áreas urbanas e periurbanas dos países de clima tropical e subtropical nas últimas décadas. As estratégias de controle vetorial, baseadas principalmente em métodos químicos e ambientais, têm sido essenciais para a redução da transmissão dessas doenças. No entanto, o aumento da resistência de vetores aos inseticidas tradicionais e a crescente urbanização têm exigido a busca por novas ferramentas e abordagens para o controle do *Aedes aegypti*. Direcionar os esforços para biomoléculas cruciais para o mosquito, como a quitina sintase, revela-se uma estratégia promissora. Esta enzima é responsável pela polimerização da quitina, biomolécula que compõe as cutículas da epiderme e da traquéia, bem como as matrizes peritróficas que revestem o epitélio intestinal. Diante disso, o estudo propôs-se, por meio de abordagens computacionais, a projetar racionalmente inibidores da quitina sintase de *Aedes aegypti* a partir de defensinas vegetais. Para tal fim, foi realizada modelagem molecular da quitina sintase e de defensinas, além de docking molecular para identificação dos complexos com mais afinidade para servirem de referência para o design racional de inibidores. Os resultados obtidos sugerem que os peptídeos gerados possuem uma interação forte e estável com a quitina sintase, indicando uma potencial atividade inibitória. A proposta apresentada neste estudo para controle do *Aedes aegypti* possui potencial para ser uma alternativa aos inseticidas químicos sintéticos tradicionais, podendo assim reduzir a população de mosquitos e, consequentemente, diminuir a transmissão de doença.

Palavras-chave: Arboviroses, Enzima, Docking molecular.

¹Graduanda em Engenharia de Biotecnologia e Bioprocessos, Unidade Acadêmica de Engenharia de Biotecnologia, UFCG, Sumé, PB, e-mail: damaresrodrigues92@gmail.com

²Doutor em Educação Física, Professor AdjuntoIV, Unidade Acadêmica de Educação do Campo, UFCG, Sumé, PB, e-mail: bruno.medeiros@professor.ufcg.edu.br



DEVELOPMENT *Aedes aegypti* OF CHITIN SYNTHASE INHIBITORS BASED ON PLANT DEFENSINS

ABSTRACT

Aedes aegypti is one of the main vectors of arboviruses that has been causing health problems for people living in urban and peri-urban areas in tropical and subtropical countries in recent decades. Vector control strategies, based mainly on chemical and environmental methods, have been essential for reducing the transmission of these diseases. However, the increase in vector resistance to traditional insecticides and growing urbanization have required the search for new tools and approaches to control *Aedes aegypti*. Targeting crucial mosquito biomolecules, such as chitin synthase, is proving to be a promising strategy. This enzyme is responsible for the polymerization of chitin, a biomolecule that makes up the cuticles of the epidermis and trachea, as well as the peritrophic matrices that line the intestinal epithelium. In view of this, the study set out, using computational approaches, to rationally design chitin synthase inhibitors for *Aedes aegypti* based on plant defensins. To this end, molecular modeling of chitin synthase and defensins was carried out, as well as molecular docking to identify the complexes with the highest affinity to serve as a reference for the rational design of inhibitors. The results obtained suggest that the peptides generated have a strong and stable interaction with chitin synthase, indicating a potential inhibitory activity. The proposal presented in this study for controlling *Aedes aegypti* has the potential to be an alternative to traditional synthetic chemical insecticides, thus reducing the mosquito population and, consequently, reducing disease transmission.

Keywords: Arboviruses, Enzyme, Molecular docking.