

ANÁLISE ESTRUTURAL PRELIMINAR DE ATPASES Na⁺/K⁺ DE HERBÍVOROS QUE SE ALIMENTAM DE CALOTROPIS PROCERA E DA FAMÍLIA DE CARDENÓLIDOS ENDÓGENOS DA PLANTA

XXXVIII Encontro de Iniciação Científica

Ana Julia Ferreira Lima, Márcio Viana Ramos, Larissa Barbosa Freitas, Marcio Viana Ramos

Danaus plexippus (Lepidoptera), *Oncopeltus fasciatus* e *Aphis nerii* (Hemiptera) são insetos especializados que se alimentam da planta *Calotropis procera* (Apocynaceae). Pelo menos 35 cardenólidos quimicamente distintos foram relatados em *C. procera*. Cardenólídeos são metabólitos secundários de plantas que compartilham um anel de lactona comum, um núcleo de esteróide e, na maioria dos casos, uma porção de açúcar. Esses compostos se ligam firmemente às Na⁺/K⁺ ATPases de membrana e, portanto, são determinantes-chave nas relações herbívoria planta/inseto. Assim, neste estudo, as ATPases Na⁺/K⁺ pertencentes aos insetos que se alimentam de *C. procera* foram modeladas e foram realizados estudos de acoplamento com os 35 cardenólidos produzidos por *C. procera*, os quais foram agrupados de acordo com suas características químicas e índice de hidropatia. O principal resíduo de glutamina (Q-104) presente no local de ligação dos cardenólidos nas ATPases Na⁺/K⁺ sensíveis, foi substituído por valina, treonina e glutamato, respectivamente em *D. plexippus*, *O. fasciatus* e *A. nerii*. O segundo resíduo chave, asparagina (N-115) foi trocado por histidina em *D. plexippus* e *O. fasciatus* e por tirosina em *A. nerii*. Além disso, uma mutação de um resíduo polar (S-302) por uma carga positiva (histidina) e os aromáticos fenilalanina e tirosina, respectivamente em *D. plexippus*, *O. fasciatus* e *A. nerii*, levando a alterações estruturais ao redor da cavidade acessadas por os cardenólidos. Treze cardenólidos não interagiram com Na⁺/K⁺ ATPase de *D. plexippus*, vinte e oito e vinte e um não interagiram com Na⁺/K⁺ ATPase de *O. fasciatus* e *A. nerii*, respectivamente. Parece haver alguma correlação entre a polaridade dos cardenólidos e a capacidade das Na⁺/K⁺ ATPases dos insetos para evitar essa interação e, portanto, a toxicidade desses compostos. Também é sugerido que *C. procera* sintetize diversos cardenólidos para superar a evolução molecular das Na⁺/K⁺ ATPases dos insetos. Por outro la

Palavras-chave: ATPase Na⁺/K⁺. Cardenólídeos. Defesa Vegetal. Látex.