



AVALIAÇÃO IN SILICO DO POTENCIAL INIBITÓRIO DA SÍNTESE DE ISOPRENOIDES EM TOXOPLASMA GONDII PELO LIMONENO

**Maria de Lourdes Oliveira Honorato¹, Antônio César Vieira da Silva²,
Valter Menezes Barbosa Filho³, Carlos Vinicius Barros Oliveira⁴**

RESUMO: A toxoplasmose é uma patologia causada pelo apicomplexa *Toxoplasma gondii* e, em mulheres grávidas ou indivíduos imunocomprometidos, pode causar sintomas graves, incluindo confusão mental, falta de coordenação e convulsões. A prenilação de proteínas é uma modificação pós-traducional covalente ubíqua encontrada em todas as células eucarióticas, consistindo na ligação de um isoprenoide farnesil ou geranylgeranyl. Ela é essencial para a atividade celular adequada de inúmeras proteínas em apicomplexas. Considerando a inibição da prenilação já documentada para *Plasmodium sp.* pelo monoterpene limoneno, o presente estudo teve como objetivo determinar o potencial inibitório deste terpeno também sobre a atividade da farnesil/geranylgeranyl difosfato sintase de *T. gondii* por meio da modelagem dessa proteína e subsequentes procedimentos de docking. A modelagem da proteína de interesse foi realizada no software AlphaFold 2, um programa de modelagem de estruturas proteicas baseado em inteligência artificial disponível no Colab. Toda a sequência de aminoácidos fornecida no banco de dados ToxoDB (identificador: TGME49_224490) foi utilizada para a predição estrutural. Após a modelagem, o modelo foi refinado no servidor YASARA e utilizado para sobreposição com a estrutura tridimensional de um ortólogo de *P. vivax* (3rbm) pelo emprego do software US-align, com o objetivo de determinar as prováveis posições de cofatores; e com pequenas moléculas no servidor SwissDock (Autodock Vina): dimetilalil difosfato (DMAPP), DMAPP + isopentenil difosfato (IPP), DMAPP + limoneno. As conformações mais semelhantes aos modelos 8f8l e 3ldw, e mais estáveis foram posteriormente analisadas. O diagrama de interação 2D gerado pelo software Discovery Studio mostra que a estabilidade do modelo com a ligação do DMAPP à Fpps libera -5,968 kcal e do IPP ao complexo Fpps + DMAPP libera -4,870 kcal/mol, além disso, o resultado da ligação do limoneno ao complexo Fpps+DMAPP foi de -4,441 kcal/mol o que pode indicar um potencial

¹ Universidade Regional do Cariri, email: maria.honorato@urca.br

² Universidade Regional do Cariri, email: cesar.silva@urca.br @ufca.br

³ Universidade Regional do Cariri, email: valter.barbosa@urca.br

⁴ Universidade Regional do Cariri, email: viniciusbluesky@gmail.com

X SEMANA UNIVERSITÁRIA DA URCA
XXVIII SEMANA DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA URCA
10 a 14 de NOVEMBRO de 2025

Tema: "UNIVERSIDADE E SOCIEDADE NA AGENDA 2030"



inibitório devido à competição nesse sítio de ligação. Resultados futuros *in vitro* devem esclarecer melhor o mecanismo associado ao efeito do limoneno na síntese de isoprenoides em *T. gondii*

Palavras-chave: Toxoplasmose. Prenilação. Limoneno. Docking. Isoprenoides