

Interação *in silico* do composto 6-gingerol com a enzima Superóxido Dismutase (SOD): perspectivas para tolerância ao estresse hídrico em plantas do Semiárido

Kelton Fernandes Caetano (Keltonbiomed@gmail.com)

Antonia Silmara Nascimento Linhares (silmaranascimento1515@gmail.com)

Beatriz Ferreira Gomes Frota (beatrizferreiragomesfrota@gmail.com)

Afonso Martins Estevam (afonsomartinsestevam00@gmail.com)

Marcus Vinícius Oliveira Barros de Alencar (marcus.alencar@uninta.edu.br)

Introdução: A baixa disponibilidade de água no Semiárido brasileiro contribui para o aumento do estresse oxidativo nas plantas. Para reduzir esse dano, enzimas antioxidantes, como a superóxido dismutase (SOD), neutralizam os radicais superóxido. Compostos naturais antioxidantes, como o 6-gingerol encontrado no gengibre, vêm sendo pesquisados por sua habilidade de contribuir para esse processo. Analisar sua interação com a SOD pode sugerir um possível uso como bioestimulante para aumentar a resistência ao estresse hídrico. **Objetivo:** Analisar, mediante simulações *in silico*, a afinidade de interação molecular entre o 6-gingerol e a enzima superóxido dismutase (SOD), como etapa preliminar para avaliar sua viabilidade como bioestimulante vegetal. **Métodos:** A docagem molecular foi realizada utilizando o servidor SwissDock. A estrutura cristalográfica da SOD (PDB ID: 1MY6) foi obtida do Protein Data Bank, sendo preparada (otimização estrutural e remoção de moléculas de água) na plataforma PlayMolecule. O ligante (6-gingerol) foi igualmente otimizado para padronização conformacional. A afinidade de ligação foi quantificada pelo AC Score. Propriedades físico-químicas relevantes para a farmacocinética vegetal (lipofilicidade, solubilidade e área de superfície polar) foram previstas pelo SwissADME. A fundamentação teórica foi complementada por revisão de literatura, considerando produções publicadas entre 2020 a 2024, no PubMed e Scielo. **Resultados:** O SwissDock gerou dez clusters de interação, com o resultado mais significativo apresentando um AC Score de -32,42, o que indica a afinidade e a estabilidade da conexão entre o composto e a SOD. Esse valor indica que o 6-gingerol pode se posicionar de maneira benéfica ao redor do sítio ativo da enzima, possivelmente ajudando a manter sua estabilidade em condições de estresse oxidativo.



III SIMPÓSIO DE BIOTECNOLOGIA no SEMIÁRIDO

No SCS-ArM15, o 6-gingerol exibiu um LogP de 3,13, sugerindo uma lipofilicidade moderada e a capacidade de penetrar na cutícula foliar. A solubilidade moderada (LogS

= -2,96) indica que o composto pode ser utilizado em formulações aquosas com uma quantidade reduzida de surfactantes. A superfície polar (TPSA = 66,78 Å²) sugere uma habilidade de permeação intracelular, condição fundamental para que a SOD alcance o citosol. Esses resultados indicam que, além de interagir energeticamente com a enzima, o composto tem características que facilitam sua absorção pela planta, o que fortalece a possibilidade de uso como bioestimulante. **Conclusão:** Os resultados indicam que o 6-gingerol pode ter um efeito modulador na atividade da SOD, o que poderia ajudar as plantas a tolerar o estresse hídrico. Sua solubilidade e permeabilidade sugerem que pode ser usado como bioestimulante natural por meio da pulverização foliar ou tratamento de sementes. Entretanto, para confirmar sua eficácia e segurança, são necessários estudos adicionais e testes em plantas em condições reais de cultivo no Semiárido.

Palavras-chave: Estresse hídrico, Superóxido Dismutase, 6-Gingerol, Docking molecular