

ANÁLISE GENÔMICA E MOLECULAR IN SILICO DO POTENCIAL CELULOLÍTICO DE 29 CEPAS DE TRICHODERMA HARZIANUM

Hilda Mara Abreu De Sousa¹
Aluisio Marques Da Fonseca²

RESUMO

A agricultura moderna enfrenta desafios socioambientais devido à alta dependência de insumos químicos. Nesse contexto, as ferramentas biológicas surgem como alternativas para promover uma produção sustentável. Espécies do gênero *Trichoderma*, com destaque para *Trichoderma harzianum*, são amplamente reconhecidas por sua eficácia como biofertilizantes e agentes de controle biológico, atuando com produtoras celulares de enzimas degradadoras de parede celular. Assim, este trabalho objetiva analisar o genoma de 29 linhagens de *T. harzianum* para avaliar a presença, o potencial de expressão e a afinidade enzimática das celulasas Thph1 e Thph2. A metodologia empregou mineração genômica local por homologia via BLASTN de genomas completos obtidos do NCBI. As sequências codificantes foram traduzidas in silico e as 58 variantes peptídicas resultantes foram modeladas tridimensionalmente no software MODELLER v10.5, com validação estereoquímica pelo Gráfico de Ramachandran. Posteriormente, realizou-se triagem por acoplamento molecular (LibDock) com o ligante celotetraose para selecionar seis sistemas representativos, os quais foram submetidos a simulações de dinâmica molecular (MD) no software GROMACS. Avaliaram-se a flexibilidade dos aminoácidos através do parâmetro de RMSF e a intensidade de hidrólise pela energia livre de ligação via método MM-PBSA. Os resultados de docking permitiram estratificar as linhagens de acordo com sua afinidade enzimática. A dinâmica molecular confirmou que polimorfismos em aminoácidos hotspots influenciam a flexibilidade local e a estabilidade do sítio ativo, evidenciando que estratégias regulatórias de degradação variam entre cepas dentro do complexo *T. harzianum*. Conclui-se que a triagem molecular in silico prediz com eficácia a taxa de hidrólise que diferencia de acordo com o genoma nas 29 cepas *T. harzianum*, interferindo diretamente na qualidade da humificação da matéria orgânica vegetal.

Palavras-chave: *Trichoderma harzianum*; celulasas; docking molecular; dinâmica molecular.

Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-brasileira, Camus das Auroras, Discente,
hilda.abreu@aluno.unilab.edu.br¹

Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-brasileira, Campus das Auroras, Docente, aluisiomf@unilab.edu.br²