XXXI Seminário de Iniciação Científica da UFERSA

Núcleo de Avaliação: Núcleo I
Área temática: Grande área do projeto
Área do Conhecimento: Biotecnologia Vegetal

Predição Estrutural e Funcional *In Silico* de Peptídeos Antimicrobianos Vegetais a Partir do Banco de Dados oneKp

Pablo Leandro Filgueira Feitosa,
Lara Vitória da Costa Bezerra, Isadora Louise Alves da Costa Ribeiro Quintana

A resistência a antibióticos é um grave problema de saúde pública global, resultante da capacidade de microrganismos desenvolverem resistência a fármacos comumente utilizados. Diante desse cenário, torna-se essencial a busca por novas estratégias para combater essa ameaça. As proteínas de transferência de lipídios (LTPs) destacam-se como pequenos peptídeos ricos em cisteína, conhecidos por sua alta estabilidade estrutural e notável potencial antimicrobiano. Com isso, o presente estudo teve como objetivo analisar sistematicamente sequências obtidas do banco de dados OneKP, visando a seleção de candidatos antimicrobianos com domínios conservados LTP1 ou LTP2, bem como a identificação de variantes estruturais ainda pouco exploradas. Para isso, as sequências foram recuperadas no banco de dados e avaliadas quanto à presença de peptídeos sinal, responsáveis pelo direcionamento intracelular das proteínas, utilizando o SignalP 6.0. Em seguida, as sequências foram alinhadas no programa T-Coffee. Os peptídeos foram caracterizados quanto às suas propriedades físico-químicas por meio do módulo Bio.SeqUtils.ProtParam da biblioteca Biopython, avaliados quanto à probabilidade de formação de agregados insolúveis com o EMBOSS pepstats e quanto ao potencial antimicrobiano no CAMPr4. As estruturas tridimensionais foram preditas utilizando o AlphaFold2. Das 11.074 peptídeos obtidos no banco de dados oneKp, 7.696 apresentaram domínios conservados característico da família LTP e foram selecionados para as etapas subsequentes. O alinhamento das 7.696 sequências revelaram heterogeneidade nos padrões de resíduos de cisteína, com predominância de seis (66,6%) ou oito (15,5%) resíduos, como indicado na literatura. As análises físico-químicas evidenciaram variações significativas nos parâmetros avaliados, com o índice de estabilidade de Guruprasad variando entre 40,1 e 67,4, a carga líquida oscilando de -3,0 a +7,2, e uma alta propensão à agregação observada em 87,7% dos peptídeos. Os modelos preditivos indicaram que 50,6% das sequências apresentam potencial antimicrobiano, sustentado por boa solubilidade e baixa tendência à agregação. A modelagem estrutural confirmou a alta qualidade das proteínas com maior conteúdo de cisteína, além de revelar divergências conformacionais em subgrupos específicos. Em conjunto, os resultados reforçam que as LTPs representam uma fonte promissora de novos agentes antimicrobianos, evidenciada pela alta proporção de peptídeo com potencial antimicrobiano e pela descobertas de novas variantes ainda pouco exploradas oferecendo subsídios relevantes tanto para pesquisas fundamentais quanto para aplicações

biotecnológicas futuras voltadas ao enfrentamento da resistência antimicrobiana.

Palavras-chave: Bioinformática, estrutura tridimensional, predição antimicrobiana, proteínas de transferência de lipídios, LTPs.

Agência financiadora: PICI-UFERSA.

Campus: Mossoró.