

Núcleo de Avaliação: Núcleo I

Área temática: Ciências Biológicas

Área do Conhecimento: Biologia Geral

Elaboração de estruturas tridimensionais de peptídeos antimicrobianos do banco PlantAMP usando modelagem *in silico*

Lara Vitória da Costa Bezerra, Pablo Leandro Figueira Feitosa, Isadora Louise Alves da Costa Ribeiro Quintans

Os peptídeos antimicrobianos (AMPs) são sequências curtas de aminoácidos, presentes em plantas, microrganismos e animais, que desempenham um papel fundamental na defesa contra patógenos. Apesar da relevância, os AMPs vegetais são menos representados nos bancos de dados, em comparação com os de outros organismos. Esse estudo teve como objetivo identificar, realizar a caracterização físico-química e modelagem das estruturas tridimensionais dos AMPs vegetais presentes no banco de dados PlantAMP. Para isso, foi realizada uma busca por domínios conservados utilizando o software HMMER (v. 3.4), analisando 940 sequências, das quais 532 apresentaram domínios conservados. Foram encontradas oito famílias de AMPs, sendo elas: snakina (com 18 domínios conservados), defensina (108), heveína (33), LTP (43), ciclotídeo (247), knottin (17), α -Hairpinina (7) e tionina (59). A classe ciclotídeo foi a encontrada em maior frequência, correspondendo a 46% das sequências identificadas. Além da identificação, as sequências foram caracterizadas quanto às suas propriedades físico-químicas, como peso molecular, ponto isoelétrico, comprimento, índice de instabilidade, carga líquida, o que pode auxiliar na compreensão de suas funções biológicas. A modelagem *in silico* foi empregada para prever a estrutura tridimensional dessas sequências, sugerindo potenciais interações com alvos patogênicos. As estruturas modeladas corresponderam, em sua maioria, aos padrões descritos para suas respectivas classes, reforçando a precisão da predição estrutural. As defensinas, por exemplo, exibiram a conformação típica de 1 α -hélice conectada a 3 folhas β . Os dados encontrados nesse estudo serão adicionados no banco de dados PlantAMP, contribuindo para um maior entendimento da atividade biológica e das potenciais aplicações dos AMPs vegetais no combate a patógenos.

Palavras-chave: AMPs, Bioinformática, Modelagem.

Agência financiadora: PICI-UFERSA

Campus: Mossoró
