

**Núcleo de Avaliação:** Núcleo I

**Área temática:** Ciências Biológicas

**Área do Conhecimento:** Biologia Geral

## **Caracterização *In Silico* de Peptídeos Antimicrobianos a partir do Banco de Dados oneKP**

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

A resistência microbiana a antibióticos ameaça a saúde global, destacando a urgência de novas terapias. Peptídeos antimicrobianos (AMPs), como tioninas e snakinas, surgem como alternativas promissoras. Este estudo analisa *in silico* peptídeos antimicrobianos vegetais dessas classes, focando em suas propriedades estruturais e funcionais para explorar potenciais aplicações terapêuticas. As sequências de tioninas e snakinas foram obtidas do banco OneKP, processadas no SignalP 6.0 para remoção de pontos de clivagem e investigadas quanto à presença de domínios conservados via HMMER. Apenas sequências com regiões conservadas foram mantidas e alinhadas no T-Coffee. As propriedades físico-químicas foram analisadas com o Biopython, e a formação de agregados insolúveis, com o EMBOSS Pepstats. A atividade antimicrobiana foi predita pelo CAMPR4, e a modelagem tridimensional realizada com o AlphaFold2. Identificaram-se 146 tioninas e 2.454 snakinas, das quais 126 e 2.185, respectivamente, apresentaram domínios conservados. O alinhamento revelou variações no número e posição de cisteínas, formando 18 grupos distintos. As análises físico-químicas mostraram uma alta concentração de cisteínas, além de variações no peso molecular, comprimento, carga líquida e ponto isoelétrico. O índice de instabilidade indicou alta estabilidade para várias sequências. Quanto à formação de agregados, 89,7 % das tioninas e 65,9 % das snakinas mostraram probabilidade de expressão em corpos de inclusão. As predições de atividade antimicrobiana apontaram que 92,1 % das tioninas e 93,7 % das snakinas têm potencial antimicrobiano. A modelagem tridimensional revelou que 31 % das tioninas apresentaram pI-DDT entre 70-79, 27,8 % entre 80-89 e 4 % acima de 90. Nas snakinas, 45,3 % das sequências ficaram entre 80-89, 32,1 % entre 70-79 e 14,3 % acima de 90. Conclui-se que as tioninas e snakinas possuem uma diversidade estrutural significativa, refletida principalmente nas variações de cisteínas e nos agrupamentos distintos formados. As análises demonstraram uma alta presença de domínios conservados e predição de atividade antimicrobiana, sugerindo que essas moléculas podem servir como modelos para o desenvolvimento de novas terapias antimicrobianas. As variações físico-químicas observadas, sobretudo no número de cisteínas, sugerem a necessidade de reclassificação das famílias estudadas. A qualidade da modelagem tridimensional confirma o potencial dessas moléculas para estudos futuros, como o *docking molecular*.

**Palavras-chave:** Bioinformática, Estrutura 3D, Caracterização molecular.

**Agência financiadora:** PIVIC/Ações Afirmativas.

---



**Campus:** Mossoró

---