

Simpósio de Integração Acadêmica

“Ciências Básicas para o Desenvolvimento Sustentável”

SIA UFV 2023



Desenho de peptídeos mínimos baseados na correlação estrutural e funcional de heveína-like HEV-CANN de *Capsicum annuum*

ARAÚJO, Ana Karolina Ferreira¹; BARACAT-PEREIRA, Maria Cristina²; GOMES, Geniana da Silva³.

¹Graduação, Bioquímica, UFV; ²Professora DBB, UFV; ³Pós-Graduação em Bioquímica Aplicada, UFV; E-mail: ana.k.araujo@ufv.br

Grande Área: Ciências Biológicas e da Saúde / Área Temática: Bioquímica / Categoria do trabalho: Pesquisa / Bolsa: PIBIC - FAPEMIG

Peptídeos mínimos, Antimicrobiano, Defesa de plantas

Introdução

Peptídeos antimicrobianos (AMPs), componentes do sistema de defesa das plantas, possuem potencial para criar produtos biotecnológicos contra patógenos. As heveínas, entre os AMPs, são destacadas pela eficácia contra organismos com quitina em sua estrutura, como esporos de fungos e exoesqueletos de insetos. A pesquisa sobre a diversidade e modo de ação das heveínas pode guiar o desenvolvimento de produtos mais potentes contra microorganismos e fungos.

Objetivos

Este trabalho objetivou estabelecer peptídeos mínimos de HEV-CANN baseados na região de interação com a quitina, por meio de análises bioinformáticas.

Materiais e Métodos

1. A sequência HEV-CANN modelo: **LCCSQFGFCGTTREY**
2. Identificação de sequências semelhantes, em plantas, com cobertura de 100%, identidade acima de 80% e e-value de 10⁵
3. Alinhamento pelo Clustal Omega e ao software MView para análise da conservação.
4. Construção da árvore filogenética no software MEGA X, com réplica de bootstrap de 1000 vezes.
5. **MUTAÇÕES**
6. Análises físico-químicas: Expasy ProtParam, ToxinPred, PSIPRED, APD3 ANTIMICROBIAL PEPTIDE DATABASE
7. DynaMut analysis and prediction of protein stability changes upon mutation using Normal Mode Analysis
8. I-TASSER Protein Structure & Function Predictions
9. dockThor
10. Mapeamento das interações: 3S

Apoio financeiro



Resultados e Discussão

Três peptídeos mínimos foram propostos: LCCSKLGLSGAGRAY(hev1), LCCSKLGLTGAGKAY (hev2) e LCCSKLGLSGAGKAY (hev3). Esses apresentaram os padrões físico-químicos de pI, carga e hidrofobicidade semelhantes aos de AMPs, além de alto potencial antimicrobiano, com alta probabilidade para atividade antibacteriana e antifúngica. O *docking* molecular dos três peptídeos resultou em múltiplas interações com a quitina, sugerindo inibição das moléculas propostas e a presença de tirosinas e aminoácidos positivos como importantes na interação.

Sequência: Interações e Mutações															
HEV 1	L	C	C	S	K	L	G	L	S	G	A	G	R	A	Y
HEV 2	L	C	C	S	K	L	G	L	T	G	A	G	K	A	Y
HEV 3	L	C	C	S	K	L	G	L	S	G	A	G	K	A	Y

Interação com a Quitina (Amarelo)
Resíduo mutado (Vermelho)

Tabela 1: Peptídeos propostos, interações e aminoácidos mutados

	ProtParam				PSIPRED		ToxinPred		iAMPred - Ação Antimicrobiana			APD3 - Predição AMP	
	pI	mm	carga	ih	predição estrutura secundária		toxicidade	hidrofobicidade	antibacteriana	antiviral	antifúngica	hidrofobicidade	potencial de ligação
HEV 1	8,9	1498,7	0	0,5				-0,05	0,64	0,41	0,77		-0,44 Kcal/mol
HEV 2	8,9	1484,8	2	0,5	coil		Toxin	-0,05	0,94	0,61	0,96	47%	-0,43 Kcal/mol
HEV 3	8,9	1470,7	2	0,5				-0,05	0,95	0,61	0,95		-0,38 Kcal/mol

Tabela 2: Resultados das análises físico-químicas. pI: Ponto Isoelétrico; mm: Massa molecular; ih: Índice de hidropatia.

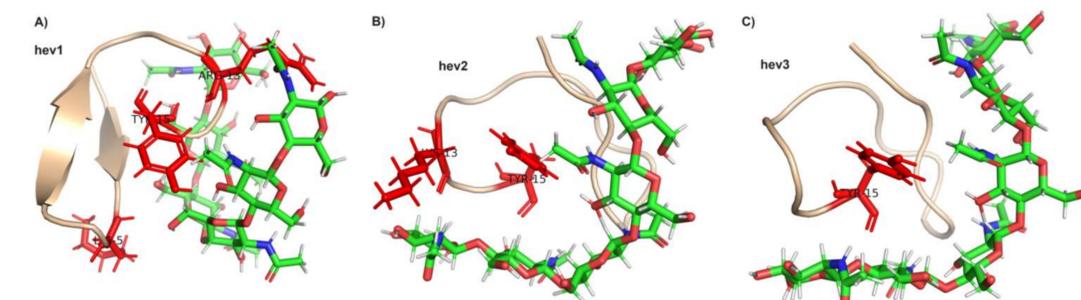


Figura 1: Docking peptídeos mínimos propostos. A) hev1. B) hev2. C) hev3. Aminoácidos importantes na interação são apresentados em vermelho.

Conclusões

Os resultados dessas análises destacam a criação de peptídeos mínimos com características antimicrobianas e/ou antifúngicas, que serão clonados para testes futuros para desenvolvimento de produtos que visam criação de novos agentes de defesa contra fitopatógenos.

Agradecimentos

