

Peptídeos análogos de toxinas de *Psilocybe cubensis* frente à *Klebsiella pneumoniae*

Adriel Parahyba Lacerda¹, Tayná de Oliveira Pereira¹, Odaias Pereira de Almeida Filho², Ludovico Migliolo³.

¹Discente de Graduação em Farmácia pela Universidade Católica Dom Bosco, Campo Grande, MS, Brasil.

²Discente de Graduação em Biomedicina, Universidade Católica Dom Bosco, Campo Grande, MS, Brasil.

³Docente Doutor responsável pelo Programa de Pós-Graduação em Biotecnologia, Universidade Católica Dom Bosco.



<http://www.seer.ufms.br/index.php/pecibes/index>

*Autor correspondente:
Adriel Parahyba Lacerda.
Universidade Católica Dom Bosco. E-mail: adrielparahybalacerda@hotmail.com

Introdução: A resistência bacteriana de certos grupos se tornou algo de grande preocupação em ambientes hospitalares, principalmente por certos grupos de bactérias resistirem à boa parte dos antibióticos comercializados atualmente. Em vista disso, os peptídeos antimicrobianos presentes em diversos organismos, tem despertado grande interesse em cientistas na busca ao combate de agentes patogênicos. Os mesmos possuem em comum sua composição de aminoácidos, anfipaticidade, carga catiônica e tamanho reduzido, o que faz com que estes peptídeos tenham a habilidade de se inserirem facilmente nas membranas lipídicas, possibilitando a morte de microrganismos causadores de doenças, tais como a bactéria *Klebsiella pneumoniae*. A *K. pneumoniae* é um bacilo Gram-negativo oportunista, pertencente à família das Enterobactérias, constituinte da microbiota intestinal, a qual pode também colonizar a pele, faringe, bexiga e trato gastrointestinal, sendo conhecida por ocasionar casos graves de infecções em pacientes imunocomprometidos. O Gênero *Psilocybe* é constituído de cogumelos psicodélicos, o qual tem muita importância devido à presença de compostos alucinógenos, caracterizados por alcalóides e indólicos derivados do aminoácido triptofano (W), especialmente a psilocibina e a psilocina. Do ponto de vista toxicodinâmico, a psilocibina e a psilocina são agonistas serotoninérgicos, com a atividade predominante sobre os receptores 5-HTA presentes nas membranas de neurônios. **Objetivo:** Diante disso, o presente estudo foi realizado por meio de desenho racional de peptídeos antimicrobianos análogos da enzima *Psilocibina sintase* de *Psilocybe cubensis*. **Método:** Devida a grande quantidade de resíduos (313 aminoácidos) presentes na enzima, foi necessário o uso da plataforma CAMPr3 para reduzir o tamanho da sequência. Assim, a enzima foi reduzida para 15 resíduos, gerando a sequência controle (Ps-Cr). **Resultados:** Por meio do Ps-Cr foram alterados determinados aminoácidos, levando a formação de um análogo (Ps-3). Ambos foram avaliados por suas características físico-químicas relacionadas a carga e hidrofobicidade, sendo validados e visualizados, por meio dos servidores *APD*, *Helixquest*, *I-TASSER*, *Pymol* e *PROCHECK*. As cargas líquidas do Ps-Cr e Ps-3 foram de +3 e +5 respectivamente. A hidrofobicidade dos peptídeos foi de 46%. Os plots ramachandran gerados pelo servidor PROCHECK apresentaram 100% dos resíduos contidos em regiões favorecidas, evidenciando a validade e conformação correta. **Conclusão:** Com isso, foi constatado que o modelo criado é válido e assim, devido à similaridade estrutural do análogo. De acordo com os resultados obtidos fica evidente que o peptídeo análogo pode ser um potencial candidato para o desenvolvimento de ferramentas biotecnológicas no controle e combate a patógenos. Assim, será sintetizado para futuros testes *in vitro* contra *K. pneumoniae*.

Palavras-chave: Biologia molecular computacional. Microbiologia. Biofilme.