

Seleção *in silico* de peptídeos análogos do veneno de *tityus serrulatus* (scorpionida) no combate ao biofilme bacteriano

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

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

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

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

Introdução: A associação e comunicação entre bactérias permitem a formação de uma comunidade complexa bacteriana, denominada biofilme, capaz de aderir a diversas superfícies. Este tipo de comunidade compromete pacientes imunodeprimidos, já que as maiores partes dos casos de infecções em todo o mundo estão relacionadas a bactérias. Em vista disso, os peptídeos antimicrobianos (PAM's) têm atraído a atenção de pesquisadores na busca de novas terapêuticas pelas suas características como quantidade pequena de resíduos, o que dificulta a detecção do sistema imune do microrganismo, o custo/benefício na síntese do mesmo, além de alta carga catiônica, o que promove a interação com o LPS (lipopolissacarídeo) das membranas celulares de bactérias. Os PAM's são amplamente distribuídos na natureza, sendo encontrados em organismos da ordem Scorpionida. A espécie de escorpião *Tityus serrulatus* tem sido objeto de estudo no desenvolvimento de PAM's devido às propriedades bioquímicas e farmacológicas encontradas no mesmo. Nesta espécie se destaca alguns peptídeos antimicrobianos, tais com Ts-Ap1 e Ts-Ap2, ativos frente a células tumorais, fungos, biofilmes e bactérias. **Objetivo:** Diante do exposto, o presente estudo foi realizado por meio de desenho racional de peptídeo antimicrobiano bioinspirado na toxina TsAp-2 de *T. serrulatus*. Os quesitos para a seleção do peptídeo em questão foram carga catiônica +3, hidrofobicidade em 47% e suas atividades antimicrobianas já citadas. **Resultados:** O TsAp-2 contém 73 resíduos de aminoácidos (aa), assim, foi reduzido para 20 aa pela ferramenta *AMP prediction* do programa *CAMP3*, o que originou a sequência controle (TsAp-2_cr). Por meio do TsAp-2_cr foram alterados determinados aa, levando a formação de um análogo (TsAp-2_M26L). Logo, o peptídeo controle e o análogo foram avaliados segundo suas características físico-químicas relacionadas a carga, hidrofobicidade, *gravy*, diagrama de hélice e validados e visualizados, por meio dos servidores *APD*, *Heliquest*, *I-TASSER*, *Pymole PROCHECK* respectivamente. As cargas líquidas do TsAp-2_cr e TsAp-2_M26L foram +5 respectivamente. A hidrofobicidade dos peptídeos foi de 40%. O *plotramachandran* gerado pelo servidor *PROCHECK* apresentou 69.2% dos resíduos de aminoácidos contidos em regiões favorecidas para o TsAp-2_cr, enquanto o TsAp-2_M26L apresentou 100%, evidenciando que o modelo é válido e apresenta conformação correta. **Conclusão:** O biofilme é uma preocupação mundial devido à sua resistência e alta capacidade infecciosa, assim, os PAM's oriundos de organismos como escorpiões, têm ganhado foco dos pesquisadores como uma medida de combate à formação de biofilme bacteriano. De acordo com os resultados obtidos fica evidente que o peptídeo análogo é um potencial candidato para o desenvolvimento de ferramentas biotecnológicas no controle e combate a microrganismos patogênicos. Assim, o mesmo será sintetizado para futuros testes *in vitro* contra bactérias resistentes e formadoras de biofilme.

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



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

*Autor correspondente:
Tayná de Oliveira Pereira,
Universidade Católica Dom Bosco - UCDB. E-mail: taynadeop@hotmail.com