

SUBMISSÃO / RESUMO-EDITAIS (PROPEGI/PROEC/PROGRAD) -
TRABALHOS LOCAIS - PESQUISA

**ANÁLISE DO POTENCIAL DE CECROPRINAS DE DROSOPHILA
MELANOGASTER NO COMBATE AO STAPHYLOCOCCUS AUREUS
RESISTENTE À METICILINA**

Tarcio Tomé Da Silva (tarcio.tomesilva@upe.br_old)

João Pacífico Bezerra Neto (pacifico.joao@upe.br)

Rita De Cássia Moura (rita.moura@upe.br)

Dentre os AMPs, as cecropinas de insetos se destacam por sua atividade contra bactérias Gram-positivas e Gram-negativas, e têm se mostrado potenciais candidatas para o desenho racional de drogas contra superbactérias. Assim, objetivou-se identificar e caracterizar cecropinas de *Drosophila melanogaster* (Dme), visando avaliar o seu potencial de interação com a proteína de resistência PBP2a de *Staphylococcus aureus* resistente à meticilina (MRSA). Para a busca por homólogos via BLASTp, foram utilizadas 1.105 sequências peptídicas de cecropinas contra o proteoma de Dme obtido no InsectBase. Foram removidos os alinhamentos redundantes e com e-value >1e-05, as sequências das candidatas foram obtidas via TBtolls-II e a integridade do domínio conservado avaliado via CDsearch. O docking molecular foi efetuado

no HDock, onde o modelo estrutural do receptor PBP2a foi obtido no Protein Data Bank (ID 1MWS). As três cecropinas identificadas possuem peptídeo sinal, atuação extracelular, ponto isoelétrico > 11, hidropaticidade negativa, peso molecular de 4,2 kDa, 40 aminoácidos, três alfa-hélices, duas fitas beta, ação antibacteriana e antifúngica. Os modelos gerados exibiram alta qualidade estereoquímica, com Z-score negativo e QMEANDisCo = 0,8. No docking molecular, os elevados valores de confidence e docking score apontaram afinidade, apesar do RMSD (Root Mean Square Deviation) também alto – o que é esperado devido ao pequeno comprimento das cecropinas e sua conformação flexível. Contudo, a análise das interfaces de ligação apresentou distâncias < 5 angstroms entre resíduos do receptor e do ligante, indicando que apesar da variabilidade conformacional prevista nos modelos das docagens, houve aproximação efetiva e formação de interações moleculares entre as cecropinas e PBP2a. Análises adicionais, como dinâmica molecular, são fundamentais para aprofundar os nossos achados e fortalecer o uso dessas cecropinas como modelos para a confecção de fármacos bioinspirados.

Palavras-chave: modelagem; pbp2a; peptídeo antimicrobiano.