

Eliane S. F. Alves^{a*}
Carolina O. Matos^a
Octavio L. Franco^b
Luciano M. Lião^a

^aUniversidade Federal de Goiás
(UFG), Faculdade de Química.

^bUniversidade Católica de Brasília
(UCB), Faculdade de Biologia.

*Autor para correspondência:
Laboratório de Ressonância
Magnética Nuclear, Instituto de
Química – Universidade Federal de
Goiás, Campus Samambaia, Goiânia,
Goiás, Brasil. 74690-900. E-mail:
eliane_ufg@yahoo.com.br Telefone:
+55(62)35211059.



II CONGRESSO DE CIÊNCIAS
FARMACÊUTICAS DO BRASIL
CENTRAL



UNIVERSIDADE ESTADUAL DE
GOIÁS
PRÓ-REITORIA DE PESQUISA E PÓS-
GRADUAÇÃO

Endereço: BR-153 – Quadra Área
75.132-903 – Anápolis –
revista.prp@ueg.br

Coordenação:
GERÊNCIA DE PESQUISA
Coordenação de Projetos e Publicações

Publicação: 30 de Junho de 2015.

RESUMO

Ressonância magnética nuclear (RMN), é uma técnica bastante utilizada para estudar as interações ligante-alvo de moléculas biologicamente ativas¹. As clavaninas são peptídeos encontrados nas células do sangue do tunicado *Styelaclava*². Este peptídeo apresenta um amplo espectro de atividades contra bactérias Gram-positivas e Gram-negativas, além de vários fungos^{2,3}. Desta forma, o presente estudo tem como objetivo observar as interações moleculares do peptídeo clavanin A (sequência: VFQFLGKIIHHVGNFVHGFHSHVF-NH₃), em diferentes meios. Para isto foram realizados experimentos de ¹H com 1 mM do peptídeo, 90% de H₂O e 10% D₂O, TMS-*d*₄, pH 4.3 e 25°C. Prepararam-se uma mostra utilizando SDS-*d*₂₅, que mimetiza membrana bacteriana, e outra com 35% de TFE-*d*₃ (co-solvente). As intensidades dos sinais de prótons aromáticos podem sugerir a exposição do peptídeo na fase aquosa⁴. Em solução os prótons aromáticos deste peptídeo apareceram na região entre 7,10 e 7,44 ppm. Os dados mostraram a atenuação dos sinais das cadeias laterais das fenilalaninas, nas posições 2, 4, 15, 19 e 23 dos H δ e H ϵ , na presença de solução de TFE-*d*₃, comparados aos respectivos prótons quando em micelas de SDS-*d*₂₅. Tomados em conjunto o comportamento dos deslocamentos químicos junto com os dados de coeficiente de difusão ordenada, sugere-se uma interação hidrofóbica entre o peptídeo antimicrobiano e o meio mimético de SDS, de forma que seus anéis aromáticos de fenilalaninas penetrem ou estejam parcialmente localizados no interior da micela ou em sua direção. Portanto, a técnica de RMN forneceu informações a respeito das interações do peptídeo, possibilitando descrever os resíduos importantes nas interações moleculares com o alvo biológico, conhecimentos essenciais no desenvolvimento de novos fármacos. Agradecemos ao apoio financeiro do Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e tecnológico.

Palavras-Chave: peptídeo; antimicrobiano; interação.

¹Lucas, L. H., Larive, C. K. Measuring ligand-protein binding using NMR diffusion experiments. **Concepts in Magnetic Resonance**, v. 20A, p. 24–41, 2004.

² Lee, I. H., Zhao, C., Cho, Y., Harwig, S. S., Cooper, E. L., Lehrer, R. I. Clavanins, α -helical antimicrobial peptides from tunicate hemocytes. **FEBS Letters**, v. 400, p. 158–162, 1997.

³Van Kan, E. J. M., Demel, R. A., Breukink, E., van der Bent, A., de Kruijff, B. Clavanin Permeabilizes Target Membranes via Two Distinctly Different pH-Dependent Mechanisms. **Biochemistry**, v. 41, p. 7529–7539, 2002.

⁴Gayen, A., Goswami, S. K., Mukhopadhyay, C. NMR evidence of GM1-induced conformational change of Substance P using isotropic bicelles. **Biochimica et biophysica acta**, v. 1808, p. 127–39, 2011.