

Eliane S. F. Alves<sup>a\*</sup>  
Carolina O. Matos<sup>a</sup>  
Octavio L. Franco<sup>b</sup>  
Luciano M. Lião<sup>a</sup>

<sup>a</sup>Universidade Federal de Goiás  
(UFG), Faculdade de Química.

<sup>b</sup>Universidade 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 ativas<sup>1</sup>. As clavaninas são peptídeos encontrados nas células do sangue do tunicado *Styelaclava*<sup>2</sup>. Este peptídeo apresenta um amplo espectro de atividades contra bactérias Gram-positivas e Gram-negativas, além de vários fungos<sup>2,3</sup>. Desta forma, o presente estudo tem como objetivo observar as interações moleculares do peptídeo clavanin A (sequência: VFQFLGKIIHHVGNFVHGFHSHVF-NH<sub>3</sub>), em diferentes meios. Para isto foram realizados experimentos de <sup>1</sup>H com 1 mM do peptídeo, 90% de H<sub>2</sub>O e 10% D<sub>2</sub>O, TMS-*d*<sub>4</sub>, pH 4.3 e 25°C. Prepararam-se uma mostra utilizando SDS-*d*<sub>25</sub>, que mimetiza membrana bacteriana, e outra com 35% de TFE-*d*<sub>3</sub> (co-solvente). As intensidades dos sinais de prótons aromáticos podem sugerir a exposição do peptídeo na fase aquosa<sup>4</sup>. 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 $\delta$  e H $\epsilon$ , na presença de solução de TFE-*d*<sub>3</sub>, comparados aos respectivos prótons quando em micelas de SDS-*d*<sub>25</sub>. 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.

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

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

<sup>3</sup>Van 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.

<sup>4</sup>Gayen, 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.