

**ID TRABALHO:** 204/2849-0

**ÁREA DO TRABALHO:** GENÉTICA DE MICROORGANISMOS E BIOINFORMÁTICA

**TÍTULO DO TRABALHO:** Prospecção In Silico De Peptídeos Antimicrobianos (Amps) Em Metagenoma De Solo Amazônico Usando Machine Learning

**AUTORES:** Joelma Dos Santos Fernandes, Thiago Fernandes Sousa, Gilvan Ferreira Da Silva

**INSTITUIÇÃO:** Embrapa Amazônia Ocidental, Manaus - AM

## RESUMO:

A Amazônia é conhecida mundialmente pela diversidade de macrorganismos, contudo pouco se conhece sobre a variedade de microrganismos, incluindo bactérias, archaeas, fungos, vírus e protozoários, sejam eles cultiváveis ou não cultiváveis. Muitos desses microrganismos possuem potencial para produção de bioinsumos com aplicações farmacêuticas e agroindustriais, como os peptídeos antimicrobianos (AMP). Os AMPs apresentam mecanismos de ação diversos, com atuação na membrana celular ou interferindo em processo intracelular vital para o patógeno. Esses compostos ganham destaque como alternativas promissoras, devido à resistência genética bacteriana causada pelo uso indiscriminado de antibióticos. Atualmente por meio de abordagens como mineração in silico é possível identificar novas moléculas bioativas de forma mais eficiente, reduzindo o tempo e os custos envolvidos nas etapas laboratoriais iniciais. Nesse contexto, este trabalho teve como objetivo realizar a prospecção in silico por AMPs a partir de dados de metagenoma obtido de amostras de solo coletadas na Reserva de Desenvolvimento Sustentável (RDS) do Rio Negro, na Amazônia. A predição das AMPs e a análise dos dados foram conduzidas por meio da ferramenta AMPEPy, que utiliza propriedades físico-químicas, estruturais e padrões de similaridade para classificar peptídeos com potencial antimicrobiano. Nas análises foram preditas 692 sequências candidatas a AMP. Dentre elas, 47 classificadas com função ainda não caracterizadas apresentaram propriedades típicas de peptídeos antimicrobianos, com características estruturais como, hidrofobicidade, carga líquida e composição de aminoácidos. Outros peptídeos, apresentaram aspecto funcional relacionados principalmente a conversão e produção de energia (15), biossíntese de parede celular e membrana (11), permitindo observar que a variedade funcional nas categorias COG sugere que os AMPs podem atuar em múltiplos processos celulares além da defesa, divisão celular e metabolismo. A análise de distribuição filogenética revelou maior abundância de AMPs associados aos filos Pseudomonadota (74 AMPs), Acidobacteriota (13), Actinomycetota (10) e Bacteroidota (1 AMP), o que reforça o papel desses grupos como reservatórios de genes com função defensiva. Quanto ao habitat de origem das sequências existe predominância em ambientes como: solo (127 AMPs), plantas (73), água (53) e associados a intestino de cupim (11), evidenciando a diversidade de nichos microbianos

dos quais essas moléculas derivam. A identificação de AMPs com propriedades estruturais promissoras e domínios funcionais demonstram a importância da prospecção em metagenomas para descoberta de novos antimicrobianos. A predição tanto de AMPs relacionadas a funções conhecidas e principalmente as desconhecidas, reforçam a necessidade de validação experimental dessas moléculas, com vistas ao desenvolvimento de novas alternativas terapêuticas e aplicações agroindustriais sustentáveis.

Palavras chave: Peptídeos Antimicrobianos - AMP, Metagenoma, Solo amazônico

Agradecimentos: Os autores agradecem ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) pelo apoio financeiro (Processo nº: 445406/2024-0/ CNPq Edital Pró-Amazônia).