

ESTUDO INICIAL DE DOCKING MOLECULAR: INIBIÇÃO DA ENZIMA ACETILCOLINESTERASE PELO CARATENOIDE BIXINA

Eduardo Menezes Gaieta¹
Regilany Paulo Colares²
Neidilênio Baltazar Soares³
Ícaro Bezerra⁴
Aluísio Marques Fonseca⁵

RESUMO

A doença de Alzheimer (DA) é conhecida como um distúrbio neurodegenerativo progressivo e irreversível que afeta o nosso cérebro em particular o neocórtex e o hipocampo. É caracterizado pela instabilidade das funções cognitivas. A hipótese colinérgica associa a DA com o déficit de acetilcolina (ACh) e sugere considerar um aumento da atividade colinérgica no cérebro dos pacientes com DA por meio de inibição da acetilcolinesterase (AChE) que é responsável por quase 80% da hidrólise da ACh no cérebro. Este trabalho tem como objetivo realizar a inibição da enzima AChE pelo caratenóide bixina. A enzima escolhida para este estudo foi obtida no repositório Protein Data Bank com código id 4EY6. Os isômeros E-bixina e Z-bixina foram desenhados no programa ChemDraw, e foram usados os programas Avogadro e AutodockTools para as parametrizações finais. Por consequente os isômeros E-bixina e Z-bixina foram dockados na enzima usando o programa Molegro virtual Docker. Após a simulação de docking, foi possível observar que os ligantes se acoplaram na mesma região que o ligante nativo e se obteve -166.965 kcal/mol de energia de ligação para Z-bixina e 1.95 de RMSD enquanto a E-bixina obteve -132.002 de energia de ligação e 1.68 de RMSD. Conclui-se assim, que os isômeros possuem capacidade de inibição frente enzima AChE, mas é apenas um resultado preliminar que precisa de ser acompanhado de outros estudos para a confirmação de que este ligante pode ser tornar um futuro fármaco frente ao alzheimer.

Palavras-chave: Alzhmeir Bixina Acetilcolinesterase Docking Molecular .

Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira, Instituto de Ciências Exatas e da Natureza, Discente, eduardomenezesgaieta@aluno.unilab.edu.br¹

Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira, Instituto de Ciências Exatas e da Natureza, Docente, regilany@unilab.edu.br²

Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira, Instituto de Ciências Exatas e da Natureza, Discente, neidileniosoares@gmail.com³

Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira, Instituto de Ciências Exatas e da Natureza, Discente, icarobezerraicaro@gmail.com⁴

Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira, Instituto de Ciências Exatas e da Natureza, Docente, aluisiomf@unilab.edu.br⁵

