

Química

MELANOGENISES: ESTUDOS IN SILICO DE INIBIDORES DA ENZIMA TIROSINASE

Mariana Cristina da Silva - 9º módulo de Química Bacharelado, UFLA, bolsista PIBIC/FAPEMIG

Elaine F. F. da Cunha - Professora do ICN/DQI, UFLA - Orientadora - Orientador(a)

Teodorico C. Ramalho - Professor do ICN/DQI, UFLA - Coorientador

Resumo

A melanogênese é o processo de pigmentação da pele, caracterizado pela produção de melanina, um pigmento escuro responsável pela coloração da pele, dos olhos e do cabelo humano. A pigmentação exerce um efeito benéfico em condições fisiológicas normais, pois protege a pele contra lesões causadas pelos raios UV. No entanto, a produção excessiva de melanina pode causar problemas dermatológicos e até mesmo câncer. A tirosinase é a enzima fundamental na biossíntese de melanina, sendo produzida por células especializadas denominadas melanócitos. Grande parte dos cosméticos e agentes de clareamento de pele disponíveis no mercado tem a função de inibir a tirosinase, mas ainda há necessidade de mais estudos para desenvolver compostos mais eficazes. A literatura indica que compostos como chalconas, resveratrol e cumarina têm a capacidade de inibir a atividade catalítica e a funcionalidade dessa enzima. O objetivo deste trabalho é realizar o ancoramento molecular (docking) de ligantes derivados de chalconas, resveratrol e cumarina, já relatados na literatura como potenciais inibidores da tirosinase (EC 1.14.18.1), no sítio ativo da enzima, com o intuito de estudar as interações entre eles. O estudo foi realizado utilizando o software Molegro Virtual Docker® (MVD), no qual a energia de interação entre o ligante e a tirosinase foi calculada. A estrutura cristalográfica da tirosinase foi obtida no banco de dados Protein Data Bank® (código PDB: 2Y9X). Os ligantes foram desenhados no software Discovery Studio® e, na mesma plataforma, foram minimizados e as cargas parciais calculadas. A partir dos valores de energia obtidos e dos valores de concentração inibitória dos ligantes, já determinados experimentalmente, é possível propor modificações estruturais visando candidatos a fármacos que poderão ser utilizados no tratamento do melasma. Palavras-chaves: melanogênese, tirosinase, inibidores, ancoramento molecular. Agradecimentos: UFLA, CAPES, CNPq e FAPEMIG.

Palavras-Chave: melanogênese, tirosinase, inibidores.

Instituição de Fomento: PIBIC/FAPEMIG

Link do pitch: https://youtu.be/l2rLbHU_fic?si=4B5-OMKqCNEjG-fa