Anais do II Congresso de Ciência e Tecnologia da PUC Goiás
Disponível em: http://pucgoias.edu.br/ucg/prope/pesquisa/anais/2016
ISSN: 2177-3327

PROPOSIÇÃO DO MODO DE LIGAÇÃO DA JABUTICABINA COM A ENZIMA LIPASE PANCREÁTICA

MATHEUS GABRIEL DE OLIVEIRA, ANDRESSA TUANE SANTANA PAZ, VINICIUS BARRETO DA SILVA
matheusgabriel06@hotmail.com

Objetivo: Propor o modo de ligação da jabuticabina no sitio ativo da enzima lipase pancreática por meio de simulações de docking. **Método:** A estrutura química da jabuticabina foi modelada em representações 2D e 3D usando os programas ACD/ChemSketch Freeware Version e Discovery Studio 6.0, respectivamente. As simulações de docking foram realizadas na enzima lipase pancreática (Código PDB: 1LPB), através do servidor Dockthor, dentro de uma esfera de 11 Å centrada no átomo de OG do resíduo de Ser152. As 10 orientações mais bem ranqueadas no sitio ativo da enzima foram selecionadas e os resultados foram analisados utilizando o programa Pymol v 1.7.4.5. **Resultados:** A molécula da jabuticabina foi capaz de se acomodar no interior do sitio ativo da enzima através de ligações eletrostáticas e hidrofóbicas. A principal interação eletrostática ocorre através de uma ligação de hidrogênio entre a porção éster da jabuticabina e os resíduos de Ser152 e His263, os quais fazem parte da tríade catalítica da enzima. Em relação as interações hidrofóbicas, a principal interação ocorre através de um empilhamento pi entre a porção resorcinol da jabuticabina e os resíduos PHE215 e TYR114 da enzima. **Conclusão:** O modo de ligação proposto para a jabuticabina sugere que a mesma é capaz de se ligar no sitio ativo da lipase pancreática através de interações intermoleculares fortes, assim os resultados auxiliam na compreensão das bases moleculares da ação inibitória do extrato de jabuticaba sobre a lipase pancreática.

Palavras-chave: obesidade. jabuticaba. docking.