



## AVALIAÇÃO IN SILICO POR DOCKING MOLECULAR DA ATIVIDADE DA CATEQUINA SOBRE A MONOAMINA OXIDASE A (MAO-A)

V Congresso Online Nacional de Química, 1ª edição, de 19/06/2023 a 22/06/2023

ISBN dos Anais: 978-65-5465-023-6

**MEDEIROS; Mônica Alves de Medeiros <sup>1</sup>, PINHEIRO; Elayne Bessa Ferreira <sup>2</sup>**

### RESUMO

A catequina, (2R,3S)-2-(3,4-dihydroxyphenyl)-3,4-dihydro-2H-chromene-3,5,7-triol, é um composto fenólico muito abundante em chá, cacau e frutas, sendo conhecida mundialmente por suas propriedades farmacológicas na prevenção e tratamento de doenças associadas à obesidade, como também cardiovasculares, diabetes e também por possuir atividade neuroprotetora não só na depressão, mas também em outras doenças neurodegenerativas como na doença de Alzheimer. Além disso, a catequina também impede o crescimento de células cancerígenas no organismo por possuir atividades quimioprotetoras. Dessa forma, esse trabalho tem como objetivo identificar se a catequina é um possível inibidor para a Monoamina oxidase A (MAO-A) e, conseqüentemente, avaliar sua eficácia no tratamento da depressão, já que estudos vêm comprovando que a MAO-A está intimamente relacionada a esse distúrbio. Nesse contexto, o método utilizado foi o docking molecular que possibilita a ancoragem entre uma proteína e um ligante visando um estudo das interações na relação estrutura-atividade. Para isso, foi utilizado o software GOLD (Genet Optimisation for Ligand Docking), que funciona como um algoritmo genético e realiza cálculos de docking, permitindo a flexibilização dos ligantes e trabalhando com a otimização de uma função fitness pré-definida – o GoldScore. Os resultados demonstraram que a catequina consegue interagir com seis resíduos de aminoácidos (LEU337, ILE180, PHE208, ILE335, PHE352, TYR69) presente no sítio ativo da enzima, das quais duas são interações Alkyl com os aminoácidos (LEU337, ILE180). Essas interações do tipo Alkyl acontecem entre grupos alquil e, conseqüentemente, geram interações hidrofóbicas que favorecem a interação entre proteína-ligante. Ademais, a catequina realizou quatro interações  $\pi$ -Alkyl com os aminoácidos (PHE208, ILE335, PHE352, TYR69). Essas interações  $\pi$ -Alkyl também possibilitam a formação de ligações hidrofóbicas, visto que nas ligações do tipo  $\pi$ -Alkyl há interação da nuvem de elétrons sobre um grupo aromático e um grupo de elétrons qualquer do grupo Alkyl. Além disso, obteve uma pontuação de score de 73,03

<sup>1</sup> Universidade Federal Rural de Pernambuco (UFRPE) - Unidade Acadêmica de Serra Talhada (UAST), alvesmonica750@gmail.com

<sup>2</sup> Universidade Federal Rural de Pernambuco (UFRPE)- Unidade Acadêmica de Serra Talhada (UAST), elaynebessa@yahoo.com.br

Kcal/mol, o que significa uma elevada interação, afinidade e especificidade entre o complexo proteína-ligante. Por fim, a catequina demonstrou ser um promissor candidato a fármaco que pode vir a contribuir no tratamento da depressão como inibidor da MAO-A. Porém, por se tratar de um estudo in silico é necessário que mais pesquisas e testes sejam realizados para avaliar in vitro e, posteriormente, in vivo o comportamento dessa molécula. (Resumo – sem apresentação).

**PALAVRAS-CHAVE:** Catequina, Depressão, Docking molecular, Monoamina oxidase A (MAO-A)