

ANÁLISE COMPARATIVA DE INTERAÇÕES MOLECULARES ENVOLVENDO MELATONINA E GLUTATIONA E ENSAIOS DPPH

Antonia Adeublena de Araújo Monteiro¹; Carlos Alonso Leite dos Santos²;

Bárbara Rayane da Silva Teles³; Antonia Eliene Duarte⁴

Resumo

A melatonina, um composto raro conservado ao longo da evolução presente nos organismos aeróbicos, possui potencial como molécula de proteção celular e influencia os ritmos biológicos. A glândula pineal é a fonte de melatonina no corpo, e sua diminuição está relacionada ao envelhecimento. A melatonina, capaz de atravessar membranas celulares, interage com proteínas no citoplasma e no núcleo. Sua ação citoprotetora vai além dos receptores, e as células contêm quantidades significativas de melatonina em comparação com a circulação sanguínea. O propósito deste estudo é avaliar a resposta do composto em questão ao teste com DPPH (2,2-difenil-1-picril-hidrazil) e examinar sua interação com a proteína 4YH2. O ensaio com DPPH foi conduzido em diferentes concentrações: 1000, 500, 250, 125 e 62,5 µg/mL. Em paralelo, realizamos o docking molecular, utilizando a proteína 4YH2 disponível no Protein Data Bank, juntamente com a representação tridimensional do composto de melatonina obtida na plataforma Chemspider. Para esse propósito, empregamos as ferramentas Avogadro, Autodocking e o Discovery Studio. No ensaio DPPH, a melatonina não apresentou capacidade antioxidante. No entanto, ao testar o ligante glutatona, observou-se uma interação com os sítios HIS C:101, ASP A:67, SER A:68, TRP A:66, ARG A:113 e VAL A:55. Por outro lado, quando utilizamos a melatonina como ligante, a interação ocorreu nos sítios VAL C:106, ALA A:109, ASP A:67, PHE A:108, SER A:68 e PRO A:14. Esses resultados destacam as diferenças nas interações moleculares entre a melatonina e o glutatona em relação aos sítios ativos analisados. A glutatona é uma substância que atua como um antioxidante importante e desempenha um papel fundamental na proteção das células contra os danos causados pelos radicais livres e outros agentes oxidantes. Em conclusão, a melatonina revelou-se ineficaz como agente antioxidante no teste do DPPH, enquanto foi empregada como ligante, as interações ocorreram em sítios, VAL C:106, ALA A:109, ASP A:67, PHE A:108, SER A:68 e PRO A:14. Essas observações ressaltam a importância das características moleculares na determinação da atividade antioxidante e das interações específicas entre compostos e alvos moleculares, com potenciais implicações para investigações futuras relacionadas à melatonina e suas aplicações terapêuticas.

Palavras-chave: Proteína. Antioxidante. Terapêuticas.

Eixo: Bioquímica e Biotecnologia

1 Universidade Regional do Cariri, email: Antonia.monteiro7@urca.br;

2 Universidade Regional do Cariri,

3 Universidade Regional do Cariri,

4 Universidade Regional do Cariri,