

INTERAÇÃO ENTRE 1 α ,25-DIHDROXIVITAMINA D3 E A α -SINUCLÉINA IN SILICO NO ESTUDO DA DOENÇA DE PARKINSON

Izabell Maria Martins Teixeira, Erlânia Alves de Siqueira, Guilherme Gomes de Oliveira, Mac Dionys Rodrigues da Costa, Ramon Roseo Paula Pessoa Bezerra de Menezes, Tiago Lima Sampaio

A doença de Parkinson (DP) é uma condição neurodegenerativa, em que ocorre perda de neurônios dopaminérgicos no sistema nervoso central, o que afeta o movimento, muitas vezes incluindo tremores. Dentre os alvos farmacológicos relacionados com essa enfermidade, a α -sinucleína é uma importante proteína que, em excesso, contribui para a degeneração neuronal. Assim, diversas substâncias são estudadas para a prevenção e tratamento da DP, dentre elas, destaca-se a vitamina D3 (VD3). Dessa forma, a utilização de técnicas especializadas de métodos in silico, como o docking molecular (DM), permitem avaliar as possibilidades de interação entre um alvo proteico e uma substância química. O presente estudo teve como objetivo avaliar a interação entre o calcitriol, forma ativa da VD3, e a α -sinucleína, por meio do DM. Foram analisadas a distância dos ligantes, o tipo de ligação e a energia livre de Gibbs (ΔG), que representa a afinidade. A distância dos ligantes foi avaliada pela RMSD (raiz quadrática do desvio médio das distâncias atômicas), onde valores ≤ 1 são considerados Ótimos, entre 1 e 1,5 Muito Bons e entre 1,51 e 2 Bons. Já o tipo de ligação pode ser baseada em sua natureza química, sendo as ligações de hidrogênio mais almejadas por serem mais fortes dentre as ligações secundárias. Ademais, o valor desejado de ΔG deve ser < -6 Kcal/mol, caracterizando uma reação exergônica, ou seja, mais favorável. A partir do ensaio in silico obteve-se uma interação que apresentou energia de afinidade favorável, igual a -10,60 Kcal/mol, indicando provável reação espontânea. A interação obtida apresenta ligações fortes, com destaque para duas ligações de hidrogênio, além de ligações hidrofóbicas, sendo determinado um valor de RMSD igual a 1,046, classificado como Muito Bom. Portanto, os resultados indicam uma ligação estável e favorável entre a VD3 e a α -sinucleína, de modo que novos estudos podem auxiliar no entendimento dessa interação no estudo da prevenção e do tratamento da DP.

Palavras-chave: DOCKING MOLECULAR. CALCITRIOL. α -SINUCLÉINA. PARKINSON.