

Estudo teórico da interação entre isoflavonóides e proteínas Forkhead box como suporte para planejamento de novos anticâncer potenciais

CAROLINA PONCIANO GOMES DE FREITAS (Autor), MELISSA SOARES CAETANO (DEQUI) (Orientador)

Instituição de Ensino - Universidade Federal de Ouro Preto

Palavras Chaves:

genisteína, quercetina, Forkhead box , anti-câncer,

Resumo:

Câncer é o nome dado ao conjunto de doenças que têm em comum o crescimento desordenado de células que invadem tecidos e órgãos podendo espalhar-se para outras regiões do corpo. A atividade biológica de isoflavonóides, como a genisteína e a quercetina, está atraindo atenção em função de suas possíveis propriedades câncer-preventivas. Família Forkhead box contém proteínas como FoxM1 e FoxO1 que são fatores de transcrição que induzem a expressão de genes envolvidos na progressão do ciclo celular. Uma expressão mais alta destas enzimas está associada com câncer. A inativação dessas enzimas pode representar uma estratégia promissora para desenvolvimento de novas e seletivas terapias anticâncer. Foram compreendidas as interações entre a genisteína e quercetina e as enzimas FoxM1 e FoxO1 via cálculos de ancoramento molecular fazendo uso do programa Molegro Virtual Docker, assim foi possível determinar quais os grupos essenciais das moléculas e aqueles que são passíveis de modificação molecular para melhorar a atividade dos ligantes. Através deste estudo foram sugeridos para síntese análogos dos isoflavonóides que apresentaram uma potencial atividade anticâncer tendo em vista a melhor interação teórica com a enzima quando comparados aos ligantes protótipos. Através da análise das interações hidrogênio do complexo enzima-ligante foram observados resíduos de aminoácidos chaves para estabilização dos compostos como Asp293, Leu291 e His 287. Espera-se que os novos compostos propostos representem um passo a frente na luta contra câncer.

Publicado em:

- Evento: Encontro de Saberes 2016
- Área: CIÊNCIAS EXATAS E DA TERRA
- Subárea: QUÍMICA