

**BIOATIVOS DE *Campomanesia xanthocarpa*: ESTUDO *IN SILICO* DE
INTERAÇÕES COM ENZIMAS DO METABOLISMO PARA FUTURA
APLICAÇÃO EM MATRIZES LÁCTEAS**

Carlos Aloísio Johann Dammann, Aniela Pinto Kempka

INTRODUÇÃO

Um problema que prevalece cada vez mais nos dias atuais é o crescimento da taxa de obesidade no mundo. A obesidade pode ter origem em fatores como estresse, sedentarismo, má alimentação e hereditariedade, e está associada ao aumento do risco de infecção, infarto, resistência à insulina, desequilíbrio da microflora intestinal, entre outras complicações de saúde. Entre os mecanismos envolvidos, destacam-se também o estresse oxidativo e a inflamação crônica de baixo grau, frequentemente observados nesse quadro metabólico. Uma das estratégias pesquisadas para mitigar esses efeitos é o consumo de compostos bioativos, como polifenóis e peptídeos, presentes em diferentes matrizes alimentares. Apesar de limitações, como baixa biodisponibilidade e insolubilidade em água, seus benefícios justificam a busca por novos produtos e substâncias com propriedades antioxidantes e antiobesidade (Lan et al., 2024). Um método possível para essa prospecção é o uso de ferramentas de simulação de docagem molecular e bancos de dados de peptídeos e polifenóis, que permitem avaliar a interação entre proteínas-alvo e moléculas bioativas, analisando parâmetros como aminoácidos residuais de contato, eletronegatividade, volume e posição da cavidade de ligação (Silva et al., 2024). Neste estudo, buscou-se comparar os resultados de docagem de proteínas relacionadas à obesidade com compostos identificados na infusão de folhas e frutos de *Campomanesia xanthocarpa* (guabiroba), considerando seu potencial funcional e o interesse em futuras aplicações combinadas com matrizes fermentadas, como o leite bovino.

DESENVOLVIMENTO

A partir da infusão de folhas e frutos de *C. xanthocarpa*, foram identificados polifenóis de relevância já descritos na literatura (Tremea et al., 2025), totalizando 14 moléculas principais: epigallocatequina galato, isoquercitrina, rutina, kaempferol-3-O-rutinosida, ácido clorogênico, ácido elágico, epicatequina, ácido ferúlico, miricetina, queracetina, catequina, kaempferol, hesperidina e cumarina. Posteriormente, realizou-se a simulação de docagem molecular no site CBdock2 (Liu et al., 2022; Yang et al., 2022), utilizando duas proteínas-alvo associadas ao metabolismo e à obesidade: HMG-CoA redutase e lipase pancreática triacilglicerol. Para cada interação, foram registrados parâmetros como pontuação Vina, volume da cavidade, centro de ligação, tamanho da docagem e resíduos de contato.

RESULTADOS

As simulações de docagem apontaram como melhores ligantes da HMG-CoA redutase a hesperidina (-9,3), o kaempferol-3-O-rutinosida (-9,1), a rutina (-8,7) e a miricetina (-8,7). Para a lipase pancreática triacilglicerol, destacaram-se a hesperidina (-8,3), o

kaempferol-3-O-rutinosida (-8,2) e a rutina (-8,1). Na HMG-CoA redutase, os ligantes apresentaram volume de cavidade constante (566 Å³; x -8, y 0, z -15), com variação no tamanho da docagem, enquanto na lipase houve maior heterogeneidade, com valores equivalentes apenas entre hesperidina e rutina. Em relação aos resíduos de contato, na HMG-CoA mais de 80% foram compartilhados entre os compostos, com exclusividade parcial para hesperidina (D312, G376 e S211) e miricetina (C224, E95, G172 e L270). Já na lipase, o kaempferol-3-O-rutinosida apresentou resíduos totalmente exclusivos, enquanto hesperidina e rutina compartilharam a maioria, com 13,5% de resíduos únicos para a rutina. Esses achados indicam que polifenóis da guabiroba interagem de forma consistente com proteínas associadas ao metabolismo lipídico e glicídico, reforçando sua relevância antioxidante e antiobesidade.

CONSIDERAÇÕES FINAIS

Na lipase pancreática, apenas uma das simulações apresentou resíduos exclusivos, o que sugere menor consistência das interações e limita a interpretação sobre sua eficiência. Já na HMG-CoA redutase, o ponto central de ligação e o volume da cavidade permaneceram constantes nos ligantes de maior afinidade, indicando maior estabilidade e probabilidade de ação. Esses resultados apontam que compostos fenólicos da guabiroba podem exercer efeitos relevantes sobre proteínas associadas ao metabolismo e, por seu reconhecido potencial antioxidante, merecem estudos futuros mais aprofundados, que estão sendo conduzidos em associação a matrizes fermentadas de leite.

Palavras-chave: compostos bioativos; enzimas metabólicas; saúde.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- LAN, He; ZHAN, Su; WANG, Shuangshuang. The anti-obesity effects of polyphenols: a comprehensive review of molecular mechanisms and signal pathways in regulating adipocytes. *Frontiers in Nutrition*, [S.l.], v. 11, 2024.
- LIU, Y.; YANG, X.; GAN, J.; CHEN, S.; XIAO, Z. X.; CAO, Y. CB-Dock2: improved protein-ligand blind docking by integrating cavity detection, docking and homologous template fitting. *Nucleic Acids Research*, [S.l.], 2022.
- SILVA, V. R. F. da; SILVA, G. B. da; MANICA, D.; DEOLINDO, C. T. P.; BAGATINI, M. D.; KEMPKA, A. P. Phytotherapeutic potential of *Campomanesia xanthocarpa* (Mart.) O. Berg: antitumor effects in vitro and in silico, with emphasis on SK-MEL-28 melanoma cells—a study on leaf and fruit infusions. In *Silico Pharmacology*, [S.l.], v. 12, p. 105, 2024.
- TREMEA, C. M. C.; SILVA, V. R. F. da; CUNICO, L.; BOFF, V. G.; DEOLINDO, C. T. P.; SILVA, A. S. da; KEMPKA, A. P. Functional properties of *Campomanesia xanthocarpa* infusions: phenolic profile, digestive stability, enzyme inhibition, and glycemic effects. *Foods*, [S.l.], v. 14, p. 2469, 2025.
- YANG, X.; LIU, Y.; GAN, J.; XIAO, Z. X.; CAO, Y. FitDock: protein-ligand docking by template fitting. *Briefings in Bioinformatics*, [S.l.], 2022

DADOS CADASTRAIS

BOLSISTA: Carlos Aloísio Johann Dammann

MODALIDADE DE BOLSA: PROBIC/UDESC (IC).

VIGÊNCIA: 09/2024 a 08/2025 – Total: 12 meses

ORIENTADOR(A): Aniela Pinto Kempka

CENTRO DE ENSINO: CEO

DEPARTAMENTO: Departamento de Engenharia de Alimentos e Engenharia Química - DEAQ

ÁREAS DE CONHECIMENTO: Engenharias/ Engenharia Química

TÍTULO DO PROJETO DE PESQUISA: Peptídeos encriptados de subprodutos agroindustriais: caracterização, desenho e atividades biológicas in silico e in vitro.

Nº PROTOCOLO DO PROJETO DE PESQUISA: NPP4000-2022