



I SIMPÓSIO PARAENSE DE PLANTAS MEDICINAIS DA AMAZÔNIA

Ancoragem Molecular do Stigmasterol no Sítio Ativo do Receptor LXR- β : Base Molecular para os Efeitos do Açaí no Metabolismo do Colesterol

Yuri F. Jales¹, Jose C. N. Glins², Renan C. e Silva³, Catharina R. S. Travassos⁴

¹Centro Universitário da Amazônia (UNIESAMAZ), Belém – Pará. yurijales@icloud.com

²Universidade Federal do Pará (UFPA), Belém – Pará. jose.glins@ics.ufpa.br

³Universidade Federal do Pará (UFPA), Belém – Pará. Renancampos@ufpa.br

⁴Universidade Federal do Pará (UFPA), Belém – Pará. crstravassos@gmail.com

Palavras-chave: ancoragem molecular, biotecnologia, açaí.

A produção de açaí em larga escala no estado do Pará traz consigo a problemática do descarte inadequado dos resíduos gerados no processamento da poupa. O trabalho busca avaliar o efeito do óleo do açaí sobre o metabolismo do Colesterol. Os resíduos de açaí foram coletados em diversas regiões do estado e os óleos foram extraídos por maceração assistida por ultrassom. O extrato foi transesterificado e sililado e então analisado por cromatografia gasosa acoplada à espectrometria de massas para a identificação de seus componentes. O rendimento obtido variou entre 1 e 3%. O principal composto identificado foi o ácido oleico (37%), além dos compostos como estigmasterol e seus derivados presentes em baixo teor, porém com atividades biológicas importantes relatadas na literatura. Neste estudo empregou-se um protocolo de ancoragem molecular para investigar a interação do stigmasterol, um fitoesterol majoritário do açaí (*Euterpe oleracea*), com o receptor nuclear LXR- β , um regulador-chave do metabolismo do colesterol. A estrutura cristalina do domínio de ligação ao ligante do LXR- β (PDB ID: 1UPV) foi preparada por protonação em pH 7.0², enquanto a estrutura do stigmasterol foi otimizada geometricamente pelo método AM1BCC⁴. As simulações, realizadas no SwissDock³ com o módulo AutoDock Vina, foram validadas por um re-docking de controle, que replicou a pose do ligante cristalográfico nativo (T0901317) com um RMSD equivalente a 0.95 Å e uma energia de afinidade de -10.714 kcal/mol. Sob estas condições validadas, o stigmasterol demonstrou uma alta afinidade de ligação de -9.472 kcal/mol⁵ pelo sítio ativo do LXR- β . A análise estrutural do complexo revelou que o stigmasterol estabelece um perfil de interações semelhante a agonistas conhecidos, incluindo interações hidrofóbicas críticas com os resíduos Leu267, Phe271, Phe329 e Trp457, fundamentais para a estabilização do complexo e a ativação do receptor. Estes resultados obtidos por modelagem computacional sugerem que o stigmasterol é um ligante de alta afinidade para o LXR- β , fornecendo, assim, uma base racional em nível molecular para os efeitos hipocolesterolêmicos previamente atribuídos ao consumo de açaí e posicionando este fitoesterol como um possível modulador natural com potencial atividade agonista, o que justifica investigações funcionais subsequentes.

1. Farnegårdh et al., Journal of Biological Chemistry, 2003, 278, 38821-38828

2. Gordon et al., Nucleic Acids Research, 2005, 33, W368-W371

3. Bugnon et al., Nucleic Acids Research, 2024.

4. Jakobsson et al., Journal of Computational Chemistry, 2002, 23, 1623-1641.

5. Eberhardt et al., Journal of Chemical Information and Modeling, 2021, 61, 3891-3898.

Agradecimentos: UNIESAMAZ, UFPA, CNPq.

