

.MODULAÇÃO DO TGF-B1 POR PEPTÍDEO CÍCLICO DE *ANNONA*: ABORDAGEM INOVADORA PARA O TRATAMENTO DO MELASMA

Antonio Guilherme Guimarães Souza², José Calado Quilenda¹, Taylline das Mercês Gonçalves¹, Malú de Andrade Marques¹, Wagner Rodrigues de Assis Soares³

1. Discente do Programa de Pós-graduação em enfermagem e saúde da UESB/BA
2. Discente do Curso de Farmácia da UESB/BA
3. Docente de graduação e da Programa de Pós-graduação em enfermagem e saúde UESB/BA

O melasma envolve inflamação e disfunção da via TGF- β . Peptídeos cíclicos de *Annona* apresentam atividade anti-inflamatória e podem modular esse microambiente, oferecendo uma abordagem promissora para o tratamento da hiperpigmentação crônica. Nosso objetivo foi avaliar a afinidade de um ciclopeptídeo natural com proteína associada ao melasma (TGF-B1). Para isso, foi selecionado a ciclosquamocina de *Annona muricata*, um fármaco inibidor galunisertib e um peptídeo endógeno e um mimético denominado SMAD7 e RIP2, a partir de bancos de dados (Pubchem), convertidas em estruturas tridimensionais (MarvinSketch) e submetidas a docking molecular utilizando os softwares AutoDockTools e Vina, para análise das interações moleculares do complexo ligante-receptor e visualização dos resultados foram utilizados os softwares, Pymol e Discovery Studio Visualizer. Os resultados mostraram que a ciclosquamocina apresentou energia de ligação competitiva (-6,8 kcal/mol) em relação ao peptídeo SMAD7 (-6,5 kcal/mol) e o RIP2 (-6,0 kcal/mol). A afinidade molecular da ciclosquamocina frente ao TGF- β 1 foi superior aos compostos comparativos, indicando seu potencial como agente terapêutico no tratamento do melasma. Esses achados reforçam sua relevância como candidato promissor e destacam a importância de validação por estudos *in vitro* e *in vivo*.

Palavras-chave: Melasma, Fator de Crescimento Transformador Beta, Peptídeos Cíclicos.

Referências:

GOODSELL, D. S. et al. Automated Docking Using a Lamarckian Genetic Algorithm and Empirical Binding Free Energy Function. **Journal of Computational Chemistry**, v. 19, n. 16, p. 1639-1662, 1998. Disponível em: <https://autodocksuite.scripps.edu/citing/>

ROYAL SOCIETY OF CHEMISTRY. doi: 10.1039/D0BM01374A.

Protein Data Bank (PDB). Disponível em: <https://www.rcsb.org/structure/7CD1>

TROTT, O.; OLSON, A. J. AutoDock Vina: improving the speed and accuracy of docking with a new scoring function, efficient optimization and multithreading. **Journal of Computational Chemistry**, v. 31, n. 2, p. 455-461, 2010. Disponível em: <https://autodock-vina.readthedocs.io/en/latest/citations.html>