

Abordagem bioinformática e *in vitro* para o estudo da inibição de metaloproteinases induzida por óleos essenciais

Vitória Schütt Zizemer, José Cláudio Fonseca Moreira

*Centro de Estudos em Estresse Oxidativo, Departamento de Bioquímica, ICBS,
UFRGS, RS, Brasil*

Óleos essenciais possuem diversas propriedades antimicrobianas e antienzimáticas. No presente estudo as propriedades inibitórias sobre metaloproteinases (MMPs) dos óleos essenciais provenientes de *Salvia fruticosa* Miller (Labiatae), *Myrtus communis* Linnaeus (Myrtaceae), *Juniperus communis* Linnaeus (Cupressaceae), e *Lavandula stoechas* Linnaeus (Labiatae) foram testadas. A composição química dos óleos essenciais foi analisada por cromatografia-espectrometria de massas. A análise bioinformática foi feita mediante o uso das bases de dados STRING 9.0 e STITCH 2.0 além do software ViaComplex. A atividade antibacteriana foi testada contra patógenos típicos de periodontite pelo método de disco-difusão e método de diluição em Agar. A proliferação celular e cito-toxicidade foi determinada por kits comerciais. As atividades de MMP-2 e MMP-9 foram determinadas por zymografia. A análise bioinformática deu lugar a um modelo de interação de proteína (MMPs e inibidores de metaloproteinases) VS. Químicos (componentes de óleos essenciais) onde proteínas e óleos essenciais interconectaram através de radicais hidroxil, oxigênio molecular e peróxido de hidrogênio. Assim mesmo, os componentes de *L. stoechas* mostraram o maior grau de interação com MMP-2 e MMP-9. Ainda que seu poder antibacteriano contra esses patógenos tenha se mostrado limitado, todos eles reduziram a atividade de MMP-2 *in vitro* nas concentrações de 1 e 5 µL/mL. As mesmas concentrações de *M. communis* e *L. stoechas* também reduziram a atividade MMP-9 sem mostrar efeito citotóxico na presença de keratinócitos. Por tanto, propomos os óleos essenciais como agentes terapêuticos potenciais como inibidores de MMP através de um mecanismo possivelmente baseado em seu potencial antioxidante.