

Comparação das Interações Moleculares de Cafeína e Adrenalina com o Receptor β 2-Adrenérgico: Implicações para a Lipólise e Performance Física

Gabriel D'Avila Barros¹, Anderson Pontes Morales², Edmo de Lima Pereira Júnior³

(1) Aluno de Iniciação Científica do PROVIC/ISECENSA – Curso de Educação Física; (2) Pesquisador Orientador - Laboratório de Fisiologia Aplicada à Saúde, Performance e Educação Física – LAPESPEF/ISECENSA – Curso de Educação Física - Institutos Superiores de Ensino do CENSA – ISECENSA, Rua Salvador Correa, 139, Centro, Campos dos Goytacazes, RJ, Brasil; (3) Professor colaborador - Laboratório de Fisiologia Aplicada à Saúde, Performance e Educação Física – LAPESPEF/ISECENSA – Curso de Educação Física - Institutos Superiores de Ensino do CENSA – ISECENSA, Rua Salvador Correa, 139, Centro, Campos dos Goytacazes, RJ, Brasil.

A cafeína é amplamente utilizada como ergogênico no esporte de endurance devido aos seus efeitos benéficos no desempenho atlético. A adrenalina, por outro lado, desempenha um papel crucial na regulação do metabolismo energético e na modulação da lipólise. Este estudo compara as interações moleculares de cafeína e adrenalina com o receptor β 2-adrenérgico, focando nas suas afinidades e tipos de interações com aminoácidos específicos. Entender essas interações pode esclarecer os mecanismos pelos quais a cafeína influencia o desempenho em atividades físicas. Utilizamos os softwares SwissDock e AutoDock para realizar o docking molecular das interações de cafeína e adrenalina com uma série de aminoácidos. As estruturas moleculares dos ligantes foram obtidas a partir do banco de dados ChEBI. A análise foi conduzida considerando as conformações de menor energia para cada ligante, com os cálculos de afinidade de ligação expressos em kcal/mol. As interações foram classificadas de acordo com o tipo de ligação, incluindo ligações de hidrogênio e interações hidrofóbicas. Os resultados mostraram que a afinidade de ligação para a cafeína foi de -4.492 kcal/mol, enquanto para a adrenalina foi de -4.527 kcal/mol. Ambos os ligantes interagiram com os aminoácidos ASP 29, GLU 30 e VAL 31 por meio de ligações de hidrogênio. A cafeína apresentou um total de 280 interações, enquanto a adrenalina apresentou 360 interações. A adrenalina apresenta uma afinidade ligeiramente maior pelo receptor β 2-adrenérgico, sugerindo uma ativação mais robusta desses receptores. No entanto, a cafeína também interage significativamente com os mesmos aminoácidos-chave, o que pode contribuir para a estimulação da lipólise através dos receptores β 2-adrenérgicos. A cafeína bloqueia os receptores de adenosina, aumentando a liberação de catecolaminas, incluindo a adrenalina, e promovendo a lipólise no tecido adiposo. Isso aumenta a disponibilidade de ácidos graxos livres e glicerol, reduzindo a percepção de esforço e melhorando a performance durante o exercício. Por outro lado, a adrenalina ativa diretamente os receptores β 2-adrenérgicos, resultando na mobilização de ácidos graxos livres e glicerol para uso como energia, além de aumentar a frequência cardíaca e a força de contração. Para aplicar essas descobertas na prática esportiva, sugere-se a suplementação de cafeína em doses de 3-6 mg/kg de peso corporal, 30-60 minutos antes do exercício. Exercícios de alta intensidade, como HIIT, podem estimular a liberação endógena de adrenalina, aumentando a energia disponível e a força muscular. A combinação estratégica de cafeína e estímulos que aumentem a adrenalina pode otimizar a performance física e a queima de gordura.

Palavras-chave: Cafeína. Adrenalina. Esporte. Nutrição Esportiva. Bioquímica.

Instituição de Fomento: ISECENSA.

Comparison of Molecular Interactions of Caffeine and Adrenaline with the β 2-Adrenergic Receptor: Implications for Lipolysis and Physical Performance

Gabriel D'Avila Barros¹, Anderson Pontes Morales², Edmo de Lima Pereira Júnior³

(1) Scientific Initiation Student at PROVIC/ISECENSA – Physical Education Course; (2) Advisor Researcher - Laboratory of Applied Physiology to Health, Performance, and Physical Education – LAPESPEF/ISECENSA – Physical Education Course - Higher Education Institutes of CENSA – ISECENSA, Rua Salvador Correa, 139, Centro, Campos dos Goytacazes, RJ, Brazil; (3) Collaborating professor - Laboratory of Applied Physiology to Health, Performance, and Physical Education – LAPESPEF/ISECENSA – Physical Education Course - Higher Education Institutes of CENSA – ISECENSA, Rua Salvador Correa, 139, Centro, Campos dos Goytacazes, RJ, Brazil.

Caffeine is widely used as an ergogenic aid in endurance sports due to its beneficial effects on athletic performance. Adrenaline, on the other hand, plays a crucial role in regulating energy metabolism and modulating lipolysis. This study compares the molecular interactions of caffeine and adrenaline with the β 2-adrenergic receptor, focusing on their affinities and types of interactions with specific amino acids. Understanding these interactions can elucidate the mechanisms by which caffeine influences performance in physical activities. We used the SwissDock and AutoDock software to perform molecular docking of the interactions of caffeine and adrenaline with a series of amino acids. The molecular structures of the ligands were obtained from the ChEBI database. The analysis was conducted considering the lowest energy conformations for each ligand, with binding affinity calculations expressed in kcal/mol. The interactions were classified according to the type of bond, including hydrogen bonds and hydrophobic interactions. The binding affinity for caffeine was -4.492 kcal/mol, while for adrenaline, it was -4.527 kcal/mol. Both ligands interacted with the amino acids ASP 29, GLU 30, and VAL 31 through hydrogen bonds. Caffeine exhibited a total of 280 interactions, while adrenaline had 360 interactions. Adrenaline shows a slightly higher affinity for the β 2-adrenergic receptor compared to caffeine, suggesting more robust receptor activation. However, caffeine also significantly interacts with the same key amino acids, which may contribute to stimulating lipolysis via β 2-adrenergic receptors. Caffeine blocks adenosine receptors, increasing catecholamine release, including adrenaline, and promoting lipolysis in adipose tissue. This enhances the availability of free fatty acids and glycerol, reducing perceived effort and improving exercise performance. Conversely, adrenaline directly activates β 2-adrenergic receptors, mobilizing free fatty acids and glycerol for energy use, and increasing heart rate and contraction force. For practical applications, it is suggested that caffeine supplementation in doses of 3-6 mg/kg body weight 30-60 minutes before exercise can benefit both endurance and strength exercises, improving muscle endurance and reducing perceived effort. High-intensity exercises, such as HIIT and compound exercises, can stimulate endogenous adrenaline release, increasing available energy and muscle strength. A strategic combination of caffeine consumption before intense training sessions and training methods that enhance adrenaline release can optimize physical performance and fat burning. Additionally, caffeine can aid in recovery by reducing muscle soreness and facilitating regeneration. Caffeine, due to its similarities in interactions with the amino acids of the β 2-adrenergic receptor, aids in lipolysis, potentially increasing energy mobilization during exercise. The strategic combination of caffeine and stimuli that increase adrenaline can optimize physical performance and fat burning.

Keywords: Caffeine. Adrenaline. Sport. Sports Nutrition. Biochemistry.

Support: ISECENSA.