

Molecular docking studies of L-cysteine (a non-essential sulfur containing aminoacid) as a potent Tyrosinase inhibitor

N. Radhakrishnan¹, S. Ashok², V. Kavitha¹, G. Rameshkumar², A. Gnanamani¹

¹ Microbiology Division, Central Leather Research Institute (CSIR-New Delhi), Adyar, Chennai, India

² AU-KBC Research Centre, MIT Campus of Anna University, Chromepet, Chennai, India

Received: August, 2012

Key words: L-cysteine; Molecular physicochemical properties; Drug-likeness properties; *Streptomyces castaneoglobisporus* tyrosinase; Molecular docking;

Summary

L-cysteine enhances resistance (anti-static) and stimulates the growth of hair and nails. In other words, it is regard as hair and nails revitalizing agent. In addition, it is required for the biosynthesis of trypanothione, coenzyme -A, hypotaurine, taurine as well as ubiquitous iron-sulfur (Fe-S) clusters, which are involved in electron transfer, redox regulation, nitrogen fixation, and sensing for regulatory processes. In the present study, we calculated molecular physicochemical and drug-likeness properties of L-cysteine using molinspiration online tool. In addition, we evaluated L-cysteine docking behavior with the copper-bound *Streptomyces castaneoglobisporus* tyrosinase and investigated its putative binding residues using Autodock 4.0. The study results reveal that L-cysteine complies very well with thumb rule of five. With reference to docking studies, L-cysteine exhibits lowest binding energy of -3.15 kcal/mol and its putative binding residues were Arginine, Glutamic acid and Tryptophan (at 55th, 182th & 184th position) respectively. Thus, our present molecular docking studies could contribute for the further, development of tyrosinase inhibitors for the prevention of hyper pigmentation.

Riassunto

La L-cistina incrementando la resistenza e stimolando la crescita sia dei capelli che delle unghie, può essere considerato un agente rivitalizzante per entrambi questi annessi cutanei. Inoltre, affinché si verifichi la biosintesi del tripanotione sintetasi è necessaria la presenza del coenzima-A, dell'ipotaurina, della taurina e del complesso ferro-zolfo (Fe-S) coinvolti nel trasferimento degli elettroni, nella regolazione del sistema ossido-riduttivo ed in altri processi di sintesi.

Con il presente studio si sono volute evidenziare sia le caratteristiche chimico-fisiche e molecolari che le attività terapeutiche della L-cistina utilizzando il mezzo informatico denominato *molinspiration* che si basa sui modelli in silicio.

Inoltre, attraverso il modello molecolare denominato *Autodock* si è cercato di valutare il legame che lega il rame alla L-cisteina nell'attività svolta dalla tirosinasi.

In riferimento agli studi effettuati con l'Autodock, la L-cisteina rivela un legame energetico molto basso pari a -3.15kcal/mol, mentre i legami Arginina-Acido glutammico e Triptofano sono stati rispettivamente pari a 55th, 182th e 184th.

Dati i risultati ottenuti, riteniamo che il nostro studio possa contribuire allo sviluppo di inibitori della tirosinasi necessaria per prevenire la comparsa delle iperpigmentazioni cutanee.