



XXXIV ENCONTRO DE JOVENS PESQUISADORES,  
XVI MOSTRA ACADÊMICA DE INOVAÇÃO E TECNOLOGIA e  
I MOSTRA DE EXTENSÃO: CONEXÕES ENTRE  
UNIVERSIDADE E COMUNIDADE.



## **IDENTIFICAÇÃO COMPUTACIONAL DE PROTEÍNAS ASSOCIADAS AO METABOLISMO FÚNGICO COMO POTENCIAIS ALVOS DE COMPOSTOS FENÓLICOS BIOATIVOS**

João Pedro De Oliveira Mezzomo (BIC-UCS), Paola Dutra da Rosa, Scheila de Avila e Silva (Orientador(a))

Os óleos essenciais constituem importante fonte de compostos bioativos com potencial antifúngico, sendo os compostos fenólicos associados à capacidade de interferir na permeabilidade de membranas celulares e em processos metabólicos microbianos. Apesar do interesse no uso desses compostos como alternativas aos antifúngicos convencionais, persistem lacunas quanto à identificação de seus alvos moleculares e mecanismos de ação no metabolismo fúngico. Este estudo teve como objetivo identificar proteínas fúngicas como potenciais alvos moleculares de compostos fenólicos recorrentes em óleos essenciais. Foram selecionados timol, carvacrol e eugenol, descritos por sua atividade antimicrobiana e antifúngica. As estruturas moleculares foram obtidas no PubChem e submetidas à triagem virtual reversa no PharmMapper, baseado em mapeamento farmacofórico reverso. Os resultados foram classificados pelo Normalized Fit Score, mantendo-se alvos com valores  $\geq 0,7$ . Após essa etapa, foram identificados 53 potenciais alvos para o carvacrol, 90 para o eugenol e 47 para o timol. Em seguida, realizou-se curadoria biológica no UniProt, considerando organismo de origem, função descrita e associação ao metabolismo fúngico. Proteínas humanas, bacterianas e alvos sem informações funcionais foram excluídos. Para Timol, foram identificadas Tetrahydroxynaphthalene reductase (Q12634), de *Pyricularia oryzae*, e Lipase B (P41365), de *Pseudozyma antarctica*, associada à atividade de triacilglicerol lipase e ao metabolismo lipídico. Para Carvacrol, foi identificada Vanillyl-alcohol oxidase (P56216), de *Penicillium simplicissimum*, relacionada à conversão de compostos fenólicos e à produção e conversão de energia. Para o eugenol, foram observados Vanillyl-alcohol oxidase (P56216), T. reductase (Q12634) e Cytochrome c peroxidase mitochondrial (P00431), de *Saccharomyces cerevisiae*, associada a processos mitocondriais, metabolismo redox e resposta ao estresse oxidativo. Os achados indicam que os compostos avaliados apresentam potenciais interações com proteínas fúngicas envolvidas em vias energéticas, metabolismo lipídico, redox e celular. Assim, a triagem virtual reversa associada à curadoria em bases biológicas mostrou-se útil para priorizar alvos moleculares e orientar futuras análises sobre mecanismos antifúngicos de compostos fenólicos derivados de óleos essenciais.

Palavras-chave: Triagem virtual reversa; compostos fenólicos; metabolismo fúngico

Apoio: UCS