

BIOPROSPECÇÃO COMPUTACIONAL DE COMPOSTOS NATURAIS CONTRA *Candida* spp.: REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Maria Rikelly Frota Aguiar (rikelly@alu.ufc.br)

Rafaela Mesquita Bastos Cavalcante (rafaelabastos.ufc@gmail.com)

Beatriz Pereira Costa (biacosta@alu.ufc.br)

Rhanna Karyne Rodrigues Muniz (rhannakaryne1@gmail.com)

Léo Jhow Vasconcelos da Silva (leojhow22@gmail.com)

Vanessa Maiara Feitosa de Araújo (Vmaiara72@gmail.com)

Victor Alves Carneiro (victor.carneiro@uninta.edu.br)

Introdução: A resistência antifúngica em espécies do gênero *Candida* representa um desafio crescente dentro da abordagem de Saúde Única (*One Health*), devido à diminuição da eficácia dos antifúngicos atualmente utilizados. Alterações nos genes ERG11, FKS1/FKS2 e FCY1/FCY2/FUR1 estão entre os principais mecanismos de resistência aos antifúngicos. Nesse contexto, as abordagens *in silico* têm se revelado eficientes para indicar mecanismos de ação de moléculas frente a enzimas-alvo, com a redução de custos. Entre essas ferramentas, o *docking* molecular (DM) se sobressai por possibilitar a modelagem estrutural e a percepção das interações entre compostos naturais e proteínas-chave de *Candida* spp., colaborando para o avanço de tratamentos antifúngicos. **Objetivo:** Mapear como o DM tem incluído a bioprospecção de compostos naturais e a otimização (semi)sintética na busca por novos agentes antifúngicos em resposta a *Candida* spp., enfatizando os alvos moleculares, classes químicas e abordagens *in silico* aplicadas nos anos recentes. **Métodos:** Realizou-se uma revisão descritiva e qualitativa (2020–2025) nas bases SciELO, PubMed e Portal de Periódicos CAPES, utilizando os descritores e operadores booleanos (*Candida AND molecular docking*) AND (*natural compounds OR bioprospecting*). Foram incluídos artigos originais que aplicaram DM com metabólitos naturais contra *Candida* spp., isoladamente ou combinados a outras abordagens computacionais, excluindo revisões e estudos sem aplicação direta da técnica. **Resultados:** Dos 155 trabalhos inicialmente identificados, apenas 10 atenderam aos critérios de inclusão. Os principais alvos moleculares foram a lanosterol 14- α -desmetilase (CYP51), as proteases aspárticas secretadas, a adesina Als3 e proteínas associadas ao



III SIMPÓSIO DE BIOTECNOLOGIA SEMÁRIO

quorum sensing. Os metabólitos secundários de afinidade mais elevada abrangeram flavonoides glicosilados (rutina, kaempferol), terpenos (linalol, cassipourol) e alcaloides (berberina, atropina), com energias de ligação comparáveis às de antifúngicos azólicos. Dentre os softwares e métodos mais empregados, sobressaíram-se AutoDock Vina, MOE e Glide (*Schrödinger*), comumente associados a MM-GBSA, Dinâmica Molecular (GROMACS, Desmond) e análises ADMET *in silico* (*SwissADME*, *pkCSM*) para otimizar e selecionar moléculas com maior potencial. **Conclusões:** Nesse sentido, compreendeu-se que a combinação de métodos computacionais, testes *in vitro*, cristalografia de proteínas, biologia molecular e estudos pré-clínicos é fundamental para validar as interações preditas *in silico* e favorecer o desenvolvimento de novos antifúngicos eficazes e seguros. Por fim, conclui-se que a bioprospecção computacional tem se mostrado eficaz na identificação de metabólitos naturais ativos frente a espécies de *Candida* spp., orientando futuras validações *in vitro*

Palavras-chave: *Candida* spp.; docking molecular; metabólitos naturais; resistência antifúngica.