LEVANTAMENTO DE COMPOSTOS NATURAIS E CARACTERIZAÇÃO DE SUAS PROPRIEDADES MOLECULARES POR DFT

Lizandra Almeida Araujo[1]; Silas Silva Santana[1]; Max Pereira Gonçalves[1]; Welyson Tiano dos Santos Ramos[1]

E-mail: lizandra.almeida@ufvjm.edu.br, welyson.ramos@ufvjm.edu.br

[1]Programa de Pós-Graduação em Ciência, Tecnologia e Inovação (PPGCTI), Instituto de Engenharia, Ciência e Tecnologia (IECT) da Universidade Federal dos Vales do Jequitinhonha e Mucuri (UFVJM), Janaúba-Minas Gerais, Brasil, CEP. 39447-814.

Área Temática: Práticas Experimentais e Interdisciplinaridade

INTRODUÇÃO: A antracnose, doença associada ao fungo *Colletotrichum gloeosporioides*, compromete a produtividade de diversas culturas agrícolas. Nesse contexto, a busca por alternativas sustentáveis ao controle fúngico tem estimulado a investigação de moléculas bioativas de origem natural. Entretanto, embora diferentes compostos apresentem atividade contra esse fungo-alvo, as relações entre suas características moleculares e os mecanismos biológicos de ação ainda são pouco compreendidas. A caracterização computacional pode contribuir para investigar propriedades estruturais, eletrônicas e de reatividade associadas às respostas biológicas observadas. **OBJETIVO:** Mapear moléculas bioativas isoladas com atividade antifúngica frente a *C. gloeosporioides*, classificá-las segundo os mecanismos de ação descritos na literatura e investigar, por meio da Teoria do Funcional da Densidade (DFT), possíveis relações entre suas características moleculares e os mecanismos biológicos observados. **METODOLOGIA:** Foi realizado levantamento bibliográfico de estudos que avaliaram individualmente moléculas isoladas frente a *C. gloeosporioides*. Foram estabelecidos critérios de inclusão e exclusão para diferenciar moléculas isoladas de extratos, frações, óleos e misturas. As informações sobre moléculas, atividade antifúngica, concentração, efeitos biológicos e mecanismos de ação foram sistematizadas em banco de dados. As moléculas foram classificadas conforme os mecanismos biológicos e os dados quantitativos de atividade ou inatividade antifúngica. Posteriormente, serão selecionadas moléculas representativas para caracterização computacional no software Gaussian, mediante otimização estrutural e cálculos de DFT. **RESULTADOS:** Foram identificadas 205 moléculas isoladas e testadas frente a *C. gloeosporioides*. A sistematização permitiu classificá-las segundo mecanismos relacionados a danos à estrutura e integridade, desenvolvimento e infecção, metabolismo e produção de energia, processos genéticos, síntese de proteínas, homeostase celular e patogenicidade. **CONCLUSÃO:** A revisão bibliográfica permitiu mapear evidências de atividade antifúngica de compostos bioativos de origem vegetal, servindo como filtro para futura caracterização computacional. As moléculas elencadas poderão ser utilizadas na análise de padrões estruturais e eletrônicos relevantes, orientando a escolha de moléculas promissoras para estudos futuros de docking molecular.

Palavras-chave: *Colletotrichum gloeosporioides*. Atividade Antifúngica. Moléculas Bioativas Isoladas. Mecanismos de Ação.

Agradecimentos e financiamento (Opcional)
À FAPEMIG (APQ-00798-24), Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de Minas Gerais – Brasil, pelo apoio à realização do presente trabalho, à UFVJM, à CAPES e ao CNPq.