

DOI: 10.35621/23587490.v7.n1.p1461-1479

AVALIAÇÃO DAS POSSÍVEIS INTERAÇÕES POR *DOCKING* MOLECULAR DOS FITOCONSTITUINTES DO ÓLEO ESSENCIAL DE *ROSMARINUS OFFICINALIS* L. EM ENZIMAS DE *CANDIDA* SPP

EVALUATION OF POSSIBLE INTERACTIONS BY MOLECULAR DOCKING OF PHYTOCHEMICALS OF THE ESSENTIAL OIL OF ROSMARINUS OFFICINALIS L. IN ENZYMES OF CANDIDA SPP

Pedro Thiago Ramalho de Figueiredo¹
Laísa Vilar Cordeiro²
Thamara Rodrigues de Melo³
Giulian César da Silva Sá⁴
Aleson Pereira de Sousa⁵

RESUMO: A grande biodiversidade de plantas medicinais encontradas no Brasil apresenta grande importância para a medicina popular, pois diversas espécies de plantas medicinais são utilizadas para o tratamento e cura de doenças. Dessa maneira, as plantas medicinais apresentam potencial na descoberta e desenvolvimento de novos fármacos. Para auxiliar nos estudos de desenvolvimentos de novos fármacos, as técnicas quimioinformáticas se tornaram uma aliada dos pesquisadores ao reduzir tempo e gastos durante este processo. Neste sentido, o óleo essencial de *Rosmarinus officinalis* L. (Lamiaceae) é conhecida popularmente como alecrim-de-jardim, alecrim-de-cheiro e apresenta importante atividade antifúngica sendo um grande fator para a descoberta de novas substâncias químicas com potencial antifúngico. Este trabalho tem como objetivo, analisar por *docking* molecular as interações de metabólitos secundários encontrados no óleo essencial de *Rosmarinus officinalis* em diferentes enzimas de *Candida* spp. Os metabólitos secundários do óleo essencial de *Rosmarinus officinalis* foram obtidos da literatura, as enzimas foram adquiridas do Protein Data Bank sob código 5TZ1 (14 α -lanosterol-demetilase) e 1EQC (exo-beta-(1,3)-glucanase) com seus respectivos ligantes. O *docking* molecular foi realizado utilizando o software Molegro Virtual Docker. Após análise do *docking* molecular, as substâncias tiveram melhor afinidade pela enzima

¹ Doutorando em Produtos Naturais e Sintéticos Bioativos, UFPB.

² Doutorando em Produtos Naturais e Sintéticos Bioativos, UFPB.

³ Doutorando em Produtos Naturais e Sintéticos Bioativos, UFPB.

⁴ Doutorando em Bioquímica, UFRN.

⁵ Doutorando em Desenvolvimento e Inovação Tecnológica em Medicamentos, UFPB.

14 α -lanosterol-demetilase, destacando o clovenol que apresentou energia de ligação semelhante ao inibidor cocristalizado. Com esse estudo podemos mostrar a importância do *docking* para a identificar possíveis locais de atuação de metabólitos secundários e sugerir que as substâncias químicas do óleo essencial podem atuar a nível de membrana celular sendo necessários estudos *in vivo* e *in vitro* para confirmação.

ABSTRACT: *The wide biodiversity of medicinal plants found in Brazil has great importance to popular medicine, due several species of medicinal plants that are used to treat and cure diseases. In this way, medicinal plants have potential in the discovery and development of new drugs. To auxiliary in the study of new drug developments, chemoinformatics techniques have become an ally of researchers by reducing time and expenses during this process. In this sense regard, the essential oil of Rosmarinus officinalis L. (Lamiaceae), popularly known as alecrim-de-jardim, alecrim-de-cheiro, exhibits important antifungal activity, being an important factor in the discovery of new chemical substances with antifungal potential. This study aims to analyze by molecular docking the interactions of secondary metabolites found in the essential oil of Rosmarinus officinalis in different enzymes of Candida spp. The secondary metabolites of the essential oil of Rosmarinus officinalis were obtained from the literature, the enzymes were obtained from Protein Data Bank under code 5TZ1 (14 α -lanosterol-demethylase) and 1EQC (exo-beta- (1,3) -glucanase) with their respective ligands. The molecular docking was performed using the Molegro Virtual Docker software. After analyzing the results, the substances had better affinity for the enzyme 14 α -lanosterol-demethylase, highlighting that clovenol presented binding energy similar to the cocrystallized inhibitor. In this study, we showed the importance of docking to identify possible active sites of secondary metabolites and suggested that the chemicals in the essential oil can act in cell membranes, requiring in vivo and in vitro studies for confirmation.*