

## CANABIDIOL COMO ALIADO CONTRA INFECÇÕES: ANÁLISE IN SILICO DE INTERAÇÕES COM PROTEÍNAS DE *STAPHYLOCOCCUS AUREUS*

LEONARDO, F. O.<sup>1\*</sup>; SOUTO, A. F. N.<sup>1</sup>; TAVARES, A. M. F.<sup>1</sup>; FERREIRA, R. G. C.<sup>1</sup>; SANTOS, C. K. M.<sup>1</sup>; BOTELHO, C. G.<sup>1</sup>; SOUZA, C. N.<sup>1</sup>; SANTOS, E. M. S.<sup>1</sup>; ALMEIDA, A. C.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>UFMG - ICA, Montes Claros, MG  
\*E.mail: leolfo@gmail.com

*Staphylococcus aureus* é um patógeno de relevância global, responsável por infecções diversas em humanos e animais, além de ser uma das principais causas de contaminação alimentar. A disseminação de cepas resistentes a antibióticos, especialmente meticilina (MRSA), representa um desafio terapêutico urgente, demandando novas alternativas. Produtos naturais surgem como fontes promissoras de moléculas bioativas. O canabidiol (CBD), fitocanabinoide não psicoativo da *Cannabis sativa*, tem demonstrado atividade antibacteriana em estudos recentes, posicionando-se como candidato potencial para estratégias antimicrobianas. Este trabalho avaliou *in silico* a interação do CBD com seis proteínas-alvo de *S. aureus* (7C7R, 7SMH, 1N67, 1YN5, 2F68 e 4K3V) obtidas no Protein Data Bank. A estrutura do CBD (ID 644019) foi recuperada do PubChem em formato SMILES. A predição de sítios de ligação e *docking* molecular foram realizados no servidor PrankWeb. Para cada proteína, analisaram-se os três *pockets* mais promissores. Os valores de energia de ligação (kcal/mol) indicaram maior afinidade média no *pocket1* ( $-6,76 \pm 1,06$ ), seguido pelos *pocket2* ( $-6,68 \pm 0,68$ ) e *pocket3* ( $-5,88 \pm 0,52$ ). O complexo 1N67/*pocket1* apresentou a interação mais estável ( $-8,35$ ), enquanto 7C7R demonstrou versatilidade com afinidades elevadas em *pocket1* ( $-7,45$ ) e *pocket2* ( $-7,52$ ). A análise estatística não revelou diferenças significativas entre as medianas dos sítios ( $p > 0,05$ ). Embora as diferenças numéricas sugiram afinidades menos favoráveis em *pocket3*, essas não foram estatisticamente significativas. Os complexos 1N67/*pocket1* e 7C7R/*pocket2* destacam-se como mais promissores para investigações futuras. O canabidiol demonstrou potencial de interação com proteínas-alvo de *S. aureus*, configurando-se como candidato promissor para experimentações que visem o desenvolvimento de antimicrobianos.

Palavras-chave: Antimicrobiano; Bioativos; Docking, Fitocanabinoides; Modelagem.