

## ANÁLISE IN SILICO DA INTERAÇÃO ENTRE LACTICINA A E PROTEÍNAS DE SUPERFÍCIE E ADESINAS DE *STAPHYLOCOCCUS AUREUS* NO CONTROLE DA MASTITE BOVINA

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

A mastite bovina é uma das principais enfermidades que afetam a pecuária leiteira, gerando impacto econômico significativo. Entre seus agentes etiológicos, *Staphylococcus aureus* se destaca pela capacidade de formar biofilmes e pela resistência a múltiplos antimicrobianos, o que compromete a eficácia dos tratamentos convencionais e evidencia a necessidade de alternativas terapêuticas. Nesse cenário, bacteriocinas, especialmente lantibióticos, emergem como agentes promissores. A Lacticina A, um lantibiótico apresenta potencial relevante para aplicação no controle de infecções por *S. aureus*. Este estudo teve como objetivo caracterizar a interação da Lacticina A com proteínas de superfície e adesinas de *S. aureus* por meio de modelagem por homologia e *docking* molecular. Foram selecionadas seis proteínas-alvo depositadas no Protein Data Bank: Bap (7C7R), SasG (7SMH), ClfA (1N67), Eap (1YN5), CNA (2F68) e MntC (4K3V). A estrutura da Lacticina A (AF-P36499-F1-v6O) foi obtida via AlphaFold. O *docking* molecular do tipo proteína-proteína foi conduzido no servidor DockWEB (PyDock), considerando a Lacticina A como ligante e as proteínas bacterianas como receptoras. Os complexos gerados foram avaliados com base no escore energético, clusterização conformacional e inspeção das interfaces de ligação. Os resultados demonstraram que a Lacticina A interage favoravelmente com todas as proteínas analisadas, apresentando escores energéticos entre -33,0 e -42,3 kcal/mol. A proteína SasG exibiu a interação mais favorável (-42,3 kcal/mol), com forte contribuição eletrostática e ganho significativo de dessolvatação, indicando um complexo estável e específico. As proteínas Bap (-42,119), Eap (-41,343) e CNA (-40,381) também mostraram afinidades notáveis. As interações sugerem predominância de contatos hidrofóbicos e ampla interface de ligação. Assim, os achados *in silico* indicam que a Lacticina A possui potencial para interagir com múltiplas adesinas de *S. aureus*, configurando-se como uma candidata promissora no desenvolvimento de novas estratégias terapêuticas. Estudos experimentais são recomendados para validação funcional dessas interações.

Palavras-chave: Antimicrobiano; Biofilme; Docking; Lantibióticos; Modelagem.