



II Simpósio Integrado das Ciências Farmacêuticas

AVANÇOS QUE CONECTAM CIÊNCIA, CUIDADO E TECNOLOGIA

AVALIAÇÃO IN SILICO DA INTERAÇÃO DO α -CADINOL COM A PROTEÍNA SarA DE *Staphylococcus aureus* POR DOCKING MOLECULAR

Felipe Thiago Barbosa de Azevedo Vieira¹; Clovis Macêdo Bezerra Filho²

Universidade Católica de Pernambuco, Unicap; Recife/PE

clovis.filho@unicap.br

INTRODUÇÃO: A resistência antimicrobiana representa um dos principais desafios da saúde pública atual, com projeções de aumento expressivo da mortalidade global causada por bactérias resistentes nas próximas décadas. *Staphylococcus aureus* resistente à meticilina (MRSA) destaca-se entre os patógenos mais preocupantes, responsável por infecções que variam entre quadros cutâneos moderados a pneumonias fatais e sepse. O uso indiscriminado de antibióticos favoreceu resistência a vários fármacos, incluindo a vancomicina, considerada tratamento de último recurso para infecções graves. Diante desse cenário, a proteína SarA atua como regulador da virulência bacteriana, controlando genes relacionados à formação de biofilme e à resposta a antibióticos, dessa maneira, tornando-se um alvo terapêutico para o desenvolvimento de novas farmacoterapias. Nesse contexto, fitoquímicos derivados de óleos essenciais de plantas da Caatinga, como a *Eugenia brejoensis*, já demonstraram atividade antimicrobiana comprovada em modelos animais com infecção cutânea por *S. aureus*, corroborando o potencial desses compostos como fonte de novos agentes terapêuticos. A partir disso, o *docking* molecular é uma ferramenta usada na etapa inicial da descoberta de fármacos, permitindo analisar a afinidade e o modo de interação entre ligantes e alvos proteicos, ajudando na escolha de compostos para avaliação experimental. **OBJETIVOS:** Avaliar, por meio de *docking* molecular, a interação do α -cadinol, um fitoquímico do óleo essencial de *Eugenia brejoensis*, com a proteína SarA de *Staphylococcus aureus*, comparando sua afinidade de ligação à da ciprofloxacina, utilizada como controle positivo. **MATERIAL E MÉTODOS:** A estrutura tridimensional da proteína SarA foi obtida do Protein Data Bank (ID: 2FRH) e o ligante α -cadinol foi retirado do PubChem. A preparação das estruturas foi realizada com CHARMM-GUI, AutoDock Tools e Open Babel. O *docking* molecular foi conduzido no AutoDock Vina. A análise das interações foi realizada no BIOVIA Discovery Studio Visualizer. **RESULTADOS E DISCUSSÃO:** O α -cadinol apresentou energia de ligação de -7,3 kcal/mol, enquanto a ciprofloxacina, no mesmo sítio proteico, obteve -8,4 kcal/mol. As interações do fitoquímico com o bolsão foram do tipo *van der Waals*, envolvendo resíduos como Glu223, Ile103, Lys105, Phe110 e Leu224. Apesar de o α -cadinol apresentar menor afinidade de ligação em comparação a ciprofloxacina, sua energia de ligação permaneceu dentro da faixa observada para candidatos promissores em estudos de *docking* molecular direcionados à proteína SarA. **CONCLUSÃO:** Os resultados indicam que o α -cadinol apresenta um possível potencial para inibir a proteína SarA, exibindo afinidade de ligação comparável em relação ao controle positivo. A abordagem *in silico* permitiu identificar esse fitoquímico como candidato a investigações experimentais, demonstrando a utilidade do *docking* molecular como ferramenta de triagem inicial.





Porém, esses achados devem ser validados por ensaios *in vitro*, incluindo a determinação da concentração inibitória mínima e a avaliação da atividade antibiofilme. Os resultados, uma vez confirmados, poderão guiar estudos de associação entre o α -cadinol e antibióticos convencionais, como uma estratégia para reverter a resistência de *S. aureus*.

PALAVRAS-CHAVE: Staphylococcus aureus. Docking molecular. Resistência antimicrobiana.

ÁREA TEMÁTICA: Farmacologia, Produtos Naturais e Pesquisa de Fármacos

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS:

LI, Yujie *et al.* Staphylococcal accessory regulator SarA-mediated modulation of autolysis and surface charge enables Staphylococcus aureus to evade vancomycin killing. **Msystems**, v. 11, n. 3, p. e01630-25, 2026.

NAGHAVI, Mohsen *et al.* Global burden of bacterial antimicrobial resistance 1990–2021: a systematic analysis with forecasts to 2050. **The Lancet**, v. 404, n. 10459, p. 1199-1226, 2024.

HOSEN, Md Eram *et al.* Mechanistic insight of Staphylococcus aureus associated skin cancer in humans by Santalum album derived phytochemicals: an extensive computational and experimental approaches. **Frontiers in Chemistry**, v. 11, p. 1273408, 2023.

DINIZ, Roseana Muniz *et al.* Antimicrobial and anti-inflammatory effects of Eugenia brejoensis essential oil in mice wounds infected by Staphylococcus aureus. **Frontiers in Pharmacology**, v. 13, p. 999131, 2022

SHARMA, Hitesh K. *et al.* Virtual screening and antimicrobial evaluation for identification of natural compounds as the prospective inhibitors of antibacterial drug resistance targets in Staphylococcus aureus. **Fitoterapia**, v. 168, p. 105554, 2023.

