

ANÁLISE IN SILICO DE SISTEMAS BACTERIANOS PARA BIODEGRADAÇÃO DE AZOCORANTES

Thamirys Alves Pereira¹; José William Ferreira da Silva² e Renato César da Silva³

¹ Instituto Federal em Educação, Ciência e Tecnologia do Sertão Pernambucano – Campus Ouricuri
thamirysalvespereira@gmail.com¹, williamfsilva0@gmail.com², renato.cesar@ifsertao-pe.edu.br³

Azocorantes são compostos aromáticos com um ou mais grupos azo (-N=N-). São os mais comumente e os mais significativos da classe de corantes sintéticos utilizados em aplicações industriais. Eles são apontados como compostos xenobióticos recalcitrantes aos procedimentos de biodegradação, e a frequência destes azocorantes nos ecossistemas aquáticos é a justificativa de sérios problemas ambientais. É possível remover corantes azóicos a partir da degradação biológica por microorganismos que possuem a capacidade de descolorir, transformar ou mineralizar completamente esses compostos de efluentes. Dentre as vantagens na utilização de sistemas bacterianos para degradação destacam-se a alternativa estritamente ecológica, facilidade de síntese e manutenção, uso de baixo teor de iodo no processo e maior eficiência para uma ampla gama de corantes dessa classe. Para a identificação de estirpes funcionais de interesse no campo da biodegradação, cientistas estão investindo primeiramente em métodos *in silico* antes de realizar tratamentos *in situ* ou *ex situ*. Esse tipo de triagem preliminar auxilia na redução dos altos custos envolvidos em técnicas experimentais, além de promover um melhor direcionamento na seleção de microorganismos viáveis ao tratamento de efluentes têxteis. Enzimas mutantes de azorredutase (AzrC) com afinidade de interação melhorada para azocorantes foram criadas por docking e validadas experimentalmente. A pesquisa explica e traz dados que a biodegradação de azocorantes reativos são necessários, a fim de desenvolver o aprimoramento dos processos de tratamento de efluentes, que não tem sido eficaz para a supressão destes grupos de corantes. E diante desta problemática, este projeto analisou sistemas bacterianos que possuem a capacidade de degradar o grupo azo em meio aquático por meio de técnicas *in silico*. Prevendo energias de interação para possíveis inibidores com azoredutases utilizando docking molecular e propondo possíveis mecanismos catalíticos para azocorantes com melhor afinidade de interação.

Palavras-chave: Azocorantes; Azorredutases; Biodegradação; Docking Molecular.

Agradecimentos: IF-Sertão Pernambucano – Campus Ouricuri