

PROPOSIÇÃO *IN SILICO* DE FILME BIODEGRADÁVEL COM AÇÃO BACTERICIDA CONTRA *Staphylococcus aureus*

Alex France Messias Monteiro^{a*}, Jéssika de Oliveira Viana^a, Renata Priscila Costa Barros^a, Marcus Tullius Scotti^a, Luciana Scotti^{a,b}

^a Universidade Federal da Paraíba, Centro de Saúde. Campus I, 50670-910, João Pessoa, PB, Brasil;

^b Gerência de Ensino e Pesquisa - Hospital Universitário da Universidade Federal da Paraíba, João Pessoa, PB, Brasil;

*E-mail: alexfrancem@gmail.com;

RESUMO

Staphylococcus aureus é uma bactéria gram-positiva comumente encontrada na pele e em fossas nasais de pessoas saudáveis, porém, pode provocar infecções simples como a acne, e/ou desencadear processos inflamatórios mais graves como a sepse. Nos pulmões pode contribuir para o surgimento de pneumonia e no cérebro pode promover a inflamação nas meninges. *S. aureus* pode ainda atuar no retardo do processo de cicatrização das lesões cutâneas; problema este que vem despertando o interesse de pesquisadores para a descoberta de novos compostos ativos contra *S. aureus*, além da busca de tecnologias farmacêuticas que melhorem a biodisponibilidade destes fármacos com a ajuda das ciências de materiais. Esta pesquisa tem como objetivo realizar uma proposição, através de ferramentas computacionais de planejamento racional, de novos fármacos um filme biodegradável com propriedades bactericida. Para isso, foi realizada uma triagem virtual para identificação de grupos farmacofóricos de fenilpropanoides com atividade contra *S. aureus*, em seguida o monômero foi proposto com base nesses grupos, então a biodegradação foi avaliada em um modelo realizado no KNIME Analytics Platform 3.6. Os possíveis metabólitos secundários foram determinados pelo software MetaSite 6.0 levando em consideração o metabolismo na pele, os metabólitos foram então submetidos a predição de riscos de citotoxicidade para a avaliação das vantagens na proposição deste polímero no tratamento bactericida pelo software gratuito OSIRIS DataWarrior 4.7.3. Como conclusão desta pesquisa, é possível propor materiais poliméricos biodegradáveis por métodos de química computacional, baseando-se nos dados obtidos, o polímero proposto apresentou bons resultados *in silico*, promissores para o desenvolvimento de um filme biodegradável com ação bactericida.

Palavras-chaves: Polímero biodegradável. *In silico*. *S. aureus*. Bactericida. Tratamento.