EFEITOS DO USO DE BIOFILMES POLIMÉRICOS INCORPORADOS COM EXTRATO DE MICROALGAS NAS PROPRIEDADES DO PESCADO

Brenda Bassan Rodrigues, Juan Philippe Teixeira, Miklos Maximiliano Bajay, Márcio Vargas Ramella

INTRODUÇÃO

A elevada atividade de água, o pH próximo à neutralidade e a presença de ácidos graxos poli-insaturados tornam o pescado suscetível a alterações microbiológicas e oxidativas durante o armazenamento. Nesse contexto, biofilmes poliméricos incorporados com constituintes naturais representam alternativas biodegradáveis na conservação desses produtos (Bazargani-Gilani, 2018; Vargas-Ramella et al., 2025). Entre as fontes naturais de interesse estão as microalgas *Arthrospira platensis* e *Parachlorella kessleri* que são associadas a diferentes grupos químicos, incluindo pigmentos, carotenoides, xantofilas, tocoferóis e ácidos graxos (Guil-Guerrero & Prates, 2025). Essa diversidade amplia as possibilidades de obtenção de materiais de interesse para alimentos, mas também dificulta a definição dos constituintes que deverão receber maior atenção na sua caracterização química e avaliação microbiológica (Bürck et al., 2024; Prates, 2025). O *docking* molecular permite comparar interações previstas entre moléculas selecionadas e proteínas bacterianas, fornecendo hipóteses para orientar e auxiliar na interpretação de etapas experimentais posteriores (Trott & Olson, 2010). Essa abordagem, entretanto, não identifica os compostos nas amostras nem comprova atividade antimicrobiana. Assim, o objetivo deste trabalho foi realizar uma triagem de compostos representativos associados às microalgas frente a alvos bacterianos, visando fornecer critérios para orientar a caracterização química dos extratos e auxiliar no planejamento e interpretação dos ensaios relacionados à conservação do pescado.

DESENVOLVIMENTO

Foram avaliados onze compostos: um pigmento tetrapirrólico do tipo ficobilina, duas clorofilas, um carotenoide, três xantofilas, um composto do tipo tocoferol e três ácidos graxos. A consideração de diferentes estados de ionização resultou em quinze estados moleculares no protocolo principal. As clorofilas foram examinadas separadamente, em caráter exploratório devido à elevada flexibilidade molecular, à presença de magnésio e às limitações relacionadas à sua parametrização. Foram selecionados cinco alvos bacterianos com estruturas disponíveis no Protein Data Bank (Berman et al., 2000): DNA girase B de *Escherichia coli*, treonil-tRNA sintetase de *Salmonella* spp., enoil-ACP redutase FabI de *Staphylococcus aureus*, regulador PrfA de *Listeria monocytogenes* e complexo VtrA/VtrC de *Vibrio parahaemolyticus*. Esses alvos estão relacionados à replicação do DNA, à síntese proteica, à biossíntese de ácidos graxos ou à regulação de fatores de virulência. O protocolo foi avaliado por redocking, adotando-se desvio quadrático médio igual ou inferior a 2,0 Å como critério de reprodução satisfatória da pose experimental. O docking foi realizado com AutoDock Vina (Trott & Olson, 2010), com rescoring complementar pelo GNINA (McNutt et al., 2021). A interpretação considerou conjuntamente as afinidades previstas, os padrões de interação proteína-ligante, a lipofilicidade e a solubilidade aquosa estimada pelo modelo ESOL (Delaney, 2004). Predições de propriedades e alertas ADMET foram empregadas como informações complementares. Esses parâmetros permitiram comparar os compostos e identificar aspectos para as próximas etapas experimentais, não constituem medidas de segurança ou atividade antimicrobiana.

RESULTADOS

O protocolo reproduziu satisfatoriamente a pose experimental na primeira posição em quatro dos cinco alvos. Para a enoil-ACP redutase FabI, uma orientação compatível com a estrutura experimental foi obtida na segunda posição, demonstrando que o protocolo amostrou a orientação esperada, embora o ordenamento das poses nesse alvo deva ser interpretado com cautela. Os diferentes estados moleculares do pigmento tetrapirrólico do tipo ficobilina apresentaram o perfil mais consistente frente aos alvos avaliados. Esses estados ocuparam posições favoráveis em diferentes proteínas e estabeleceram combinações de interações polares, iônicas e hidrofóbicas. O estado de ionização influenciou as afinidades previstas, os padrões de interação e a solubilidade estimada. Esse comportamento indica que o pH deverá ser considerado nas próximas etapas, pois poderá alterar a forma química, a solubilidade e a disponibilidade desses constituintes nos extratos, biofilmes e meios empregados nos ensaios microbiológicos (Delaney, 2004). Embora o pigmento do tipo ficobilina tenha apresentado o comportamento mais recorrente, sua priorização deve ser compreendida como uma indicação para verificação química e investigação experimental. As predições complementares apresentaram alerta para seus diferentes estados moleculares, o que não comprova toxicidade, mas impede conclusões sobre aplicação alimentar. Os resultados também não comprovam sua presença ou concentração nas amostras, sua permanência após a incorporação nos biofilmes ou sua contribuição para eventual resposta antimicrobiana. O carotenoide, as xantofilas e o composto do tipo tocoferol apresentaram afinidades numericamente favoráveis em alguns alvos. Entretanto, esses resultados estiveram associados à elevada lipofilicidade, à baixa solubilidade aquosa estimada e ao predomínio de contatos hidrofóbicos. Consequentemente, os escores não devem ser interpretados isoladamente como evidência de maior especificidade ou atividade antimicrobiana (Kittelson et al., 2026). Para esses grupos, as etapas posteriores deverão verificar sua ocorrência nas amostras e considerar sua dispersão, estabilidade, incorporação e disponibilidade nas matrizes poliméricas. Os ácidos graxos apresentaram afinidades menos destacadas frente às proteínas selecionadas. Esse resultado não exclui possíveis respostas microbiológicas associadas a mecanismos não representados pelo protocolo, incluindo interações com membranas bacterianas (Obukhova & Murzina, 2024). Portanto, esses compostos deverão permanecer entre os grupos contemplados na caracterização química e nos ensaios microbiológicos. As clorofilas, avaliadas em caráter exploratório, não forneceram base suficientemente confiável para o estabelecimento de uma prioridade comparativa, em razão de sua flexibilidade molecular e das limitações relacionadas à parametrização do magnésio (Tabela 1).

CONSIDERAÇÕES FINAIS

A triagem orientou a futura caracterização química e cromatográfica e o planejamento dos ensaios aplicados ao pescado. O pigmento tetrapirrólico do tipo ficobilina apresentou o perfil mais consistente, devendo ser priorizado para verificação de sua possível relação com as respostas microbiológicas, considerando a influência do pH. Carotenoides, xantofilas e compostos do tipo tocoferol deverão ser interpretados com sua identificação química e comportamento nas matrizes poliméricas. Os ácidos graxos deverão permanecer na avaliação, pois possíveis efeitos sobre membranas bacterianas não foram contemplados pelo *docking*, enquanto os resultados das clorofilas deverão ser considerados exclusivamente exploratórios.

Palavras-chave: *Arthrospira platensis*; *Parachlorella kessleri*; bactéria patogênica; inocuidade alimento; *docking* molecular; metabólito bioativo; embalagem funcional.

ANEXOS

Tabela 1. *Interpretação da triagem molecular e direcionamento experimental dos compostos avaliados.*

Grupo avaliado	Interpretação dos resultados	Direcionamento experimental
Pigmento tetrapirrólico do tipo ficobilina	Perfil mais consistente frente ao conjunto de alvos, com influência do estado de ionização sobre as afinidades, interações e solubilidade estimada	Verificar sua ocorrência nas amostras e priorizar a investigação microbiológica, considerando a influência do pH e sem inferir segurança
Carotenoide e xantofilas	Afinidades favoráveis em alguns alvos, acompanhadas de elevada lipofilicidade, baixa solubilidade estimada e predomínio de contatos hidrofóbicos	Avaliar ocorrência, dispersão, estabilidade, incorporação e disponibilidade nos extratos e biofilmes
Composto do tipo tocoferol	Afinidade favorável em alvo específico, associada à elevada lipofilicidade e à baixa solubilidade estimada	Verificar sua ocorrência e seu comportamento na matriz polimérica
Ácidos graxos	Afinidades menos destacadas frente aos alvos proteicos avaliados	Manter na caracterização química e avaliar experimentalmente respostas microbiológicas que possam envolver membranas bacterianas
Clorofilas	Avaliação exploratória limitada pela flexibilidade molecular, presença de magnésio e incertezas de parametrização	Não estabelecer prioridade comparativa com base nos resultados atuais

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Bazargani-Gilani, B. (2018). Activating sodium alginate-based edible coating using a dietary supplement for increasing the shelf life of rainbow trout fillet during refrigerated storage (4 ± 1 °C). *Journal of Food Safety*, *38*(1), e12395. https://doi.org/10.1111/jfs.12395

Berman, H. M., Westbrook, J., Feng, Z., Gilliland, G., Bhat, T. N., Weissig, H., Shindyalov, I. N., & Bourne, P. E. (2000). The Protein Data Bank. *Nucleic Acids Research*, *28*(1), 235–242. https://doi.org/10.1093/nar/28.1.235

Bürck, M., Ramos, S. dos P., & Braga, A. R. C. (2024). Enhancing the Biological Effects of Bioactive Compounds from Microalgae through Advanced Processing Techniques:

Pioneering Ingredients for Next-Generation Food Production. *Foods*, *13*(12), 1811. https://doi.org/10.3390/foods13121811

Delaney, J. S. (2004). ESOL: Estimating aqueous solubility directly from molecular structure. *Journal of Chemical Information and Computer Sciences*, *44*(3), 1000–1005. https://doi.org/10.1021/ci034243x

Guil-Guerrero, J. L., & Prates, J. A. M. (2025). Microalgae Bioactives for Functional Food Innovation and Health Promotion. *Foods*, *14*(12), 2122. https://doi.org/10.3390/foods14122122

Kittelson, K. S., Martins, A. C. F., Santos, R. P., Celante, G., & da Silva Gomes, R. (2026). Reproducibility, validation, and failure modes across classical and AI-driven molecular docking. *Journal of Computer-Aided Molecular Design*, *40*(1), 137-. https://doi.org/10.1007/s10822-026-00849-8

McNutt, A. T., Francoeur, P., Aggarwal, R., Masuda, T., Meli, R., Ragoza, M., Sunseri, J., & Koes, D. R. (2021). GNINA 1.0: molecular docking with deep learning. *Journal of Cheminformatics*, *13*(1), 43-. https://doi.org/10.1186/s13321-021-00522-2

Obukhova, E. S., & Murzina, S. A. (2024). Mechanisms of the Antimicrobial Action of Fatty Acids: A Review. *Applied Biochemistry and Microbiology*, *60*(6), 1035–1043. https://doi.org/10.1134/S0003683824605158

Prates, J. A. M. (2025). Applications of Bioactive Compounds from Marine Microalgae in Health, Cosmetics, and Functional Foods. *Applied Sciences (Switzerland)*, *15*(11), 6144. https://doi.org/10.3390/app15116144

Trott, O., & Olson, A. J. (2010). AutoDock Vina: Improving the speed and accuracy of docking with a new scoring function, efficient optimization, and multithreading. *Journal of Computational Chemistry*, *31*(2), 455–461. https://doi.org/10.1002/jcc.21334

Vargas-Ramella, M., da Silva, D., Dilarri, G., Zortea, A. V. L., Mendes, C. R., de Souza Laurentino, G., Campagnol, P. C. B., de Oliveira, A. F., & da Silveira, C. B. (2025). Quality effects of sodium alginate coating cross-linked with CaCl2 on Mugil liza fillets during storage. *Food Control*, *170*, 111048. https://doi.org/10.1016/j.foodcont.2024.111048