

Moléculas híbridas de base biológica com propriedades corantes e conservantes

Novais C,^{1,2,3} Molina AK,^{1,2} Abreu RMV,^{1,2} Santos-Buelga C,³ Ferreira ICFR,^{1,2} Pereira C^{1,2*}

¹Centro de Investigação de Montanha (CIMO), Instituto Politécnico de Bragança, Campus de Santa Apolónia, 5300-253 Bragança, Portugal. *carlap@ipb.pt

²Laboratório Associado para a Sustentabilidade e Tecnologia em Regiões de Montanha (SusTEC), Instituto Politécnico de Bragança, Campus de Santa Apolónia, 5300-253 Bragança, Portugal

³Grupo de Investigación en Polifenoles (GIP-USAL), Facultad de Farmacia, Campus Miguel de Unamuno s/n, Universidad de Salamanca, 37007, Salamanca, Spain

A necessidade crescente de alimentar a população mundial em expansão, aliada ao aumento da consciência e das expectativas dos consumidores, tem impulsionado a evolução dos sistemas, processos e produtos na indústria alimentar. Apesar dos avanços significativos feitos no que respeita aos aditivos alimentares, a pesquisa de novas gerações mais seguras e saudáveis tem vindo a ganhar destaque.

Os aditivos de origem natural, além de colorir ou conservar, podem oferecer benefícios à saúde. No entanto, enfrentam frequentemente desafios de estabilidade, sustentabilidade e rentabilidade, reforçando a necessidade de soluções inovadoras¹.

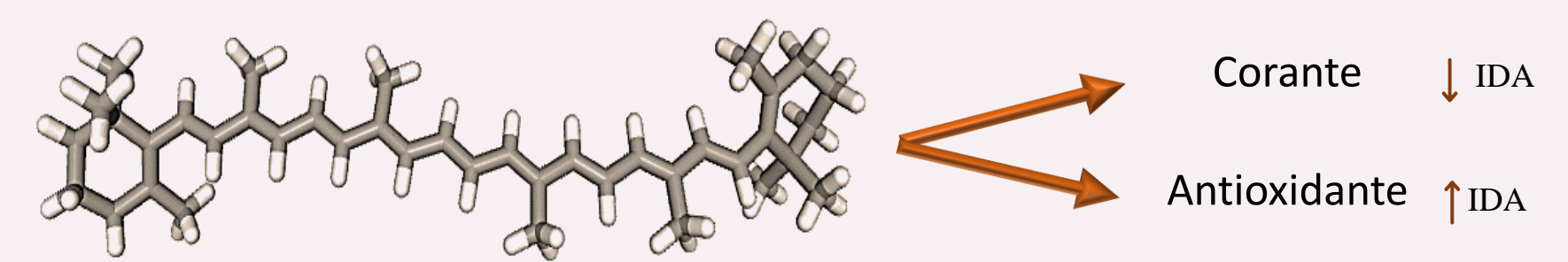


Fig.1. β -Caroteno, exemplo de uma molécula com capacidade dupla.

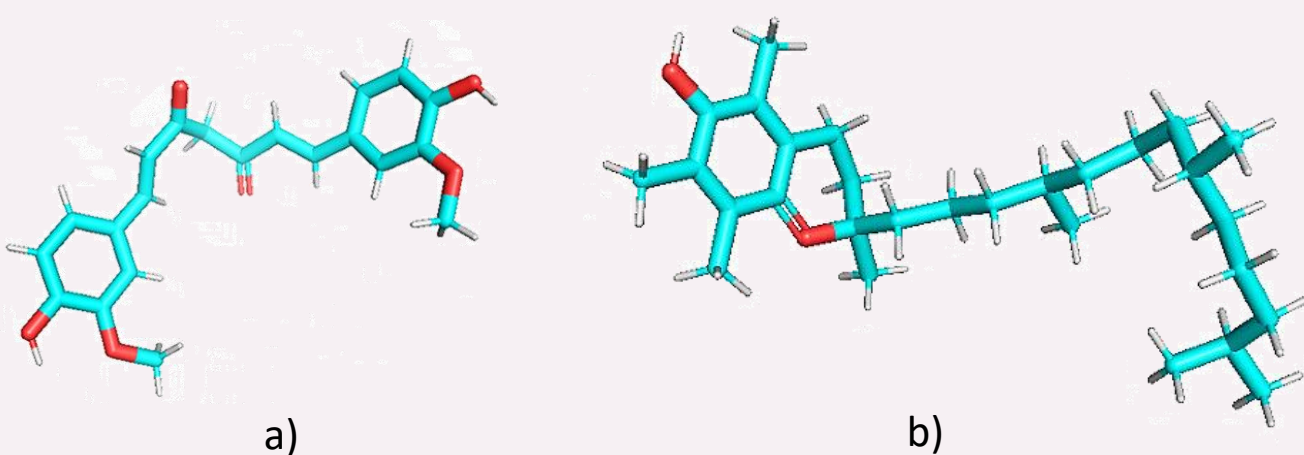


Fig.2. Exemplos de aditivos aprovados pela EFSA com diferentes funções:
a) Curcumina, corante; e b) γ -Tocoferol, antioxidante.

Encontrar compostos que combinem capacidades corantes e conservantes, além de funções bioativas, pode ser uma solução promissora. No entanto, para obter benefícios como atividade antioxidante ou antimicrobiana, são necessárias concentrações elevadas, frequentemente acima da ingestão diária admissível (IDA) (Fig.1). Além disso, a autorização regulatória para o uso destes compostos pode ser demorada devido à necessidade de avaliações rigorosas de toxicidade e segurança².

A investigação e o desenvolvimento de novas moléculas, através da modificação de moléculas naturais já conhecidas e aceites (Fig.2), para melhorar o duplo desempenho (corante e conservante), podem ajudar a contornar estas dificuldades e rentabilizar o uso destas moléculas aditivas na indústria alimentar.

A complexação não-covalente é um processo natural e um mecanismo essencial para estabilizar e intensificar as cores azul, violeta e vermelha em flores, vegetais e frutas, bem como em produtos alimentares derivados. O interesse crescente na copigmentação tem sido notável, especialmente pela indústria alimentar, com o objetivo de ampliar a paleta de cores.

Tendo em vista o seu domínio e utilização através da seleção dos melhores copigmentos a serem adicionados aos produtos alimentares, o controlo preciso (assistido por computador) das montagens supramoleculares de copigmentos supramoleculares não covalentes é essencial (Fig.3). A copigmentação com moléculas antioxidantes/antimicrobianas pode gerar aditivos alimentares inovadores com propriedades melhoradas de conservação e coloração, impulsionados pelo uso de ferramentas avançadas de quimioinformática, explorando uma ampla gama de biomoléculas para desenvolver novos compostos de base biológica.³

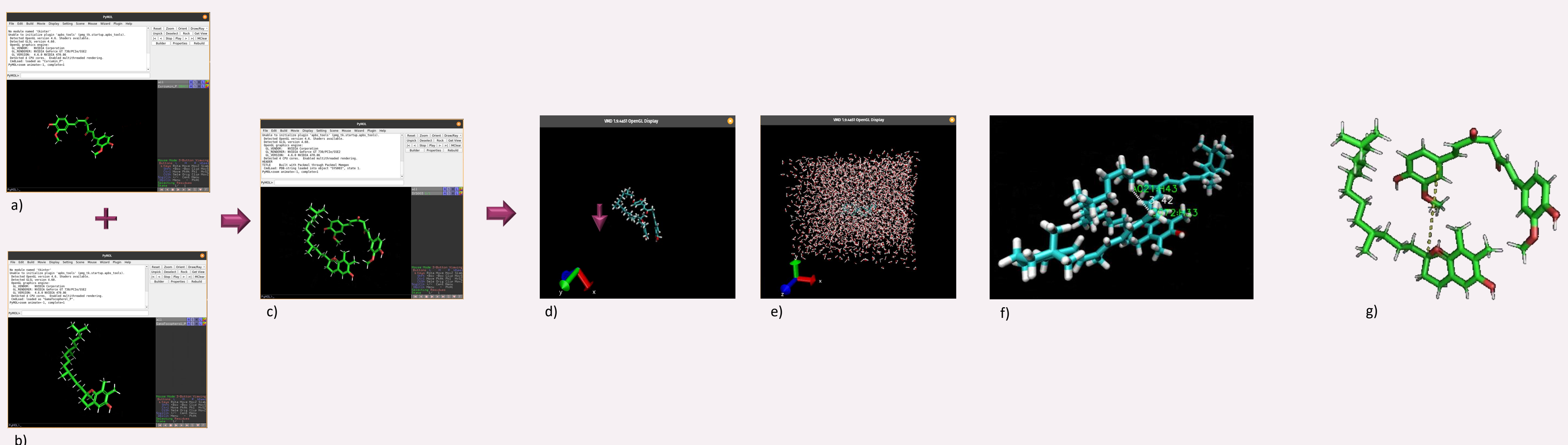


Fig.3. Exemplo de testes preliminares da ligação entre as moléculas de Curcumina (a) e γ -Tocoferol (b). Moléculas juntas no mesmo sistema de teste (c). Simulação de dinâmica molecular no software VMD (d); (e); (f). Potencial local de ligação (g).

Nesse sentido, e com os avanços observados em computadores e metodologias computacionais para auxílio experimental *in silico*, a utilização destas tecnologias na investigação e desenvolvimento de moléculas híbridas à base de produtos biológicos, mais seguras e eficientes, com dupla funcionalidade, permite prever e verificar resultados experimentais, possibilitando ainda o estudo de certas características físicas difíceis de examinar em laboratório. Esta abordagem permite acelerar a pesquisa neste tópico de grande relevância atual.

Referências

- Martins, N., Roriz, C.L., Morales, P., Barros, L., Ferreira, I.C.F.R., 2016, Food colorants: Challenges, opportunities and current desires of agro-industries to ensure consumer expectations and regulatory practices, *Trends in Food Science & Technology*, 53, 1–15.
- Martins, F.C.O.L., Sentanin, M.A., de Souza, D., 2019, Analytical methods in food additives determination: Compounds with functional applications, *Food Chemistry*, 272, 732–750.
- Paramita, V.D., Kasapis, S., 2019, Molecular dynamics of the diffusion of natural bioactive compounds from high-solid biopolymer matrices for the design of functional foods, *Food Hydrocolloids*, 88, 301–19.

Agradecimentos

Os autores agradecem à Fundação para a Ciência e a Tecnologia (FCT, Portugal) e aos fundos nacionais FCT/MCTES (PIDDAC) pelo apoio financeiro ao CIMO (UIDB/00690/2020 e UIDP/00690/2020) e SusTEC (LA/P/0007/2020). Financiamento nacional pela FCT – Fundação para a Ciência e a Tecnologia, no âmbito da celebração do contrato-programa de emprego científico institucional com C. Pereira e bolsas de doutoramento de C. Novais (2021.05369.BD) e A. K. Molina (2020.06231.BD). O GIP-USAL tem o apoio financeiro do “Ministerio de Ciencia and Innovación” Espanhol (PID2019-106167RB-I00) e “Junta de Castilla y León” (SA093P20 and CLU-2018-04).