

USO DA MODELAGEM MOLECULAR NA INVESTIGAÇÃO DA OXIDAÇÃO LIPÍDICA EM ÓLEO DE PEIXE POR MEIO DA INTERAÇÃO COM OXIGÊNIO ATMOSFÉRICO.

Isabella Minto Martins¹, Maria Milena de Lima Oliveira², Abel Ferreira Gomes Neto³.

¹Graduanda em Direito e Engenharia de Pesca, Bolsista e Voluntária de projetos no CNPq.

²Nutricionista, Pós-graduanda em Nutrição Clínica, Graduanda em Engenharia de Pesca, Bolsista e Voluntária de projetos no CNPq.

³Doutor em Engenharia de Recursos Naturais da Amazônia e Docente no Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Pará - Campus Castanhal.

Correspondência: isabellamartins17092000@gmail.com

Os óleos de peixe são ricos em ácidos graxos poliinsaturados, como o ômega-3 e ômega-6 e possuem grande relevância nutricional por oferecer ácidos graxos com propriedades funcionais essenciais à saúde humana. No entanto, a presença de múltiplas insaturações torna esses lipídios altamente suscetíveis à oxidação durante a estocagem, o que resulta na formação de compostos tóxicos e perda da qualidade sensorial e nutricional. O objetivo do trabalho é investigar as interações moleculares do ômega-3 e ômega-6 com o oxigênio, avaliando a energia de afinidade, distância de interação e tipo de ligação, com foco na propensão à oxidação e impacto na qualidade desse óleo. Como metodologia, foram realizadas docagens moleculares entre ácidos graxos e oxigênio com uso de softwares de modelagem. As estruturas foram criadas e otimizadas no Avogadro e Gaussian, analisadas no AutoDock4 e AutoDock Tools, e visualizadas no software Discovery Studio. Os resultados obtidos indicam que as moléculas de ácido docosahexaenoico e ácido eicosapentaenóico apresentaram uma energia de afinidade de -0,8 kcal/mol. Esse valor sugere uma maior propensão dessas moléculas a interagir com o oxigênio, o que pode levar a um aumento no processo de oxidação, comprometendo sua qualidade. A média da distância de interação entre as moléculas e o oxigênio foi de 2,44785 Å, fornecendo uma medida adicional da proximidade e potencial de interação entre os compostos. Em todas as docagens, o tipo de interação que ocorreu foi a H-Acceptor, ou seja, ligações do tipo aceitadoras de hidrogênio. Este tipo de interação intermolecular ocorre quando um átomo de hidrogênio é atraído por um átomo altamente eletronegativo, como o oxigênio. A conclusão do estudo indica que os ácidos graxos poli-insaturados presentes nos óleos de peixe, especialmente o ácido docosahexaenoico (DHA) e o ácido eicosapentaenoico (EPA), apresentam elevada propensão à interação com o oxigênio, evidenciada pela energia de afinidade de -0,8 kcal/mol e pela distância média de 2,44785 Å, o que reforça sua vulnerabilidade ao processo oxidativo, além disso, o tipo de interação predominante identificado foi H-Acceptor, caracterizado pela atração de átomos de hidrogênio pelo oxigênio, altamente eletronegativo, confirmando o risco de formação de produtos de oxidação que comprometem a qualidade nutricional e sensorial desses lipídios. Dessa forma, torna-se essencial adotar estratégias eficazes de conservação e armazenamento para preservar as propriedades funcionais e os benefícios à saúde associados ao consumo de ômega-3 e ômega-6.

Palavras-chave: ácidos graxos; lipídios; oxidação; peixe.