

ESTUDO DE PROCESSOS DE BIORREMEDIÇÃO DE METAIS PESADOS COM CIANOBACTÉRIAS EM ÁREAS CONTAMINADAS: ENFOQUE PRÉ-MODELAGEM MOLECULAR

STUDY OF HEAVY METAL BIORREMEDIATION PROCESSES WITH CYANOBACTERIA IN CONTAMINATED AREAS: A PRE-MOLECULAR MODELING APPROACH

Gabriel Seuffetelles Purificação

Aluno de Graduação em Química, 7º período, FTESM

Período PIBIC: maio de 2025 à agosto de 2025

gabrielpurificacao9@gmail.com

Julio Cesar Guedes Correia

Orientador, Químico Industrial, D.Sc.

jguedes@cetem.gov.br

Alexandre Nelson Martiniano Caraúta

Coorientador, Químico, D.Sc.

alexandre.carauta@souzamarques.br

RESUMO

As cianobactérias têm despertado crescente interesse científico por serem potenciais alternativas biotecnológicas viáveis para a biorremediação de ambientes contaminados com metais pesados, devido à sua capacidade de sobreviver e prosperar em condições adversas. Este trabalho apresenta uma revisão bibliográfica detalhada sobre os mecanismos de adsorção e absorção desses metais por diferentes espécies de cianobactérias, com ênfase especial no papel dos exopolissacarídeos (EPS) e das metalotioneínas (MTs) na captura e detoxificação dos íons metálicos. Os EPS atuam principalmente na biossorção superficial, funcionando como barreiras extracelulares que retêm os metais, enquanto as MTs são proteínas responsáveis pela complexação intracelular dos íons metálicos, auxiliando na sua neutralização e armazenamento seguro dentro das células. A modelagem molecular é destacada como uma ferramenta promissora para estudar essas interações em nível atômico, especialmente pela disponibilidade de estruturas tridimensionais de MTs em bancos de dados. Além disso, a análise comparativa entre diferentes espécies de cianobactérias evidencia a importância da seleção criteriosa de cepas com maior eficiência de biossorção, bem como da integração entre dados experimentais e simulações computacionais para o desenvolvimento e aperfeiçoamento de tecnologias sustentáveis de remediação ambiental baseadas no uso dessas microalgas.

Palavra-chave: cianobactérias, metais pesados, biorremediação, exopolissacarídeos, metalotioneínas, modelagem molecular.

ABSTRACT

Cyanobacteria have emerged as promising biotechnological tools for the bioremediation of environments contaminated with heavy metals, due to their metabolic versatility and resistance to toxic conditions. This study presents a literature review on the mechanisms of metal adsorption and absorption by different cyanobacterial species, focusing on the role of exopolysaccharides (EPS) and metallothioneins (MTs) in metal ion capture and detoxification. EPS are primarily involved in surface biosorption, acting as extracellular matrices that bind metals, while MTs participate in intracellular complexation, contributing to the neutralization and safe storage of toxic ions. Molecular modeling is discussed as a valuable tool to investigate these interactions at the atomic level, particularly with the availability of three-dimensional structures of MTs. Comparative data between species highlight the importance of selecting specific strains with high biosorption potential and integrating experimental results with computational simulations. This integrative approach contributes to the advancement of

environmentally sustainable technologies for the remediation of heavy metal-contaminated areas using cyanobacteria.

Keywords: cyanobacteria, heavy metals, bioremediation, exopolysaccharides, metallothioneins, molecular modeling.

1. INTRODUÇÃO

Metais pesados (MPs) são elementos de alta densidade que não são degradados pelo ambiente, acumulando-se ao longo do tempo. Metais como cobre, zinco e ferro, são essenciais ao organismo humano, enquanto outros, como cádmio, arsênio, chumbo e mercúrio, são tóxicos mesmo em pequenas quantidades (KALITA e BARUAH, 2023; AL-AMIN et al., 2021; SENTHAMILSELVI et al., 2024). Esses metais não são metabolizados e se acumulam no organismo, podendo causar danos graves, como distúrbios cognitivos, anemia, doenças renais, respiratórias, cardiovasculares, neurodegenerativas e malformações congênitas (JOMOVA et al., 2025). No ambiente aquático, podem ser absorvidos por plânctons e se concentrar nos níveis mais altos da cadeia alimentar por biomagnificação, atingindo maiores níveis em peixes e aves marinhas.

As cianobactérias apresentam notável capacidade de remover os MPs do ambiente por meio de dois mecanismos principais: adsorção, que ocorre na superfície celular (extracelular), e absorção, que envolve o transporte dos íons metálicos para o interior da célula (intracelular). A eficiência desses processos depende de diversos fatores, incluindo a concentração inicial do metal, tempo de contato, pH, temperatura, salinidade, dureza da água, quantidade de biomassa disponível e diferentes cepas (KALITA e BARUAH, 2023).

A modelagem molecular é uma ferramenta da química computacional, que utiliza de softwares como ORCA, GROMACS, Gaussian, para o desenvolvimento de modelos tridimensionais de moléculas de estudo. Essas simulações permitem prever propriedades estruturais e comportamentos moleculares que seriam inacessíveis por métodos analíticos, otimizando investigações científicas. Por meio dessas ferramentas, é possível analisar interações intramoleculares e intermoleculares, identificar conformações estáveis, estudar mecanismos de reação e avaliar a afinidade entre ligantes e seus alvos, o que é fundamental em áreas como a descoberta de fármacos, a ciência de materiais e a biologia estrutural. Essa abordagem permite prever comportamentos moleculares complexos, reduzindo a necessidade de experimentação extensiva e otimizando investigações em áreas como biotecnologia e ciência de materiais (PESSÔA, et al., 2018).

2. OBJETIVO

Realizar um estudo bibliográfico para analisar os mecanismos envolvidos na atuação das cianobactérias na biorremediação de metais pesados, a fim de identificar etapas moleculares críticas que possam ser exploradas em futuros estudos de modelagem computacional.

3. METODOLOGIA

Este projeto foi desenvolvido por meio de um estudo bibliográfico com foco na atuação das cianobactérias em processos de biorremediação de metais pesados, visando levantar informações que subsidiem futuras simulações de modelagem molecular. A metodologia adotada consistiu em uma revisão sistemática da literatura científica, com a seleção e análise de publicações relevantes nas áreas de microbiologia ambiental, bioquímica, biotecnologia e modelagem molecular.

As fontes de pesquisa incluíram artigos científicos disponíveis em bases de dados acadêmicas reconhecidas, como Scopus, *Multidisciplinary Digital Publishing Institute* (MDPI), *PubMed*, *ScienceDirect*, *Google Scholar* e o *Protein Data Bank* (PDB). Foram utilizadas palavras-chave como: "cyanobacteria", "bioremediation", "heavy metals", "molecular modeling", "biosorption", "bioaccumulation", "metallothionein", "EPS".

Foram priorizados artigos publicados nos últimos 25 anos, com ênfase naqueles que apresentam evidências experimentais ou teóricas sobre os mecanismos moleculares envolvidos na interação entre cianobactérias e íons metálicos tóxicos, tais como cádmio (Cd^{2+}), chumbo (Pb^{2+}), mercúrio (Hg^{2+}), cromo (Cr^{+}), entre outros.

4. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Segundo Al-Amin et al. (2021), a parede celular das cianobactérias possui caráter aniónico, típico de bactérias Gram-negativas, devido à presença de grupos carboxílicos nos peptidoglicanos, no qual os principais sítios de adsorção de metais pesados estão localizados em componentes da membrana, como proteínas, lipídios, lipopolissacarídeos e, principalmente, exopolissacarídeos (EPS). Estes últimos se destacam por sua alta afinidade por cátions metálicos, atribuída à presença de ácidos urônicos e em alguns casos sulfatos, que conferem carga negativa à matriz extracelular. Já o transporte intracelular dos metais ocorre inicialmente por difusão passiva, favorecida pelo gradiente de concentração. Em situações de estresse ou necessidade de regulação, a célula pode acionar mecanismos de transporte ativo. Os três principais tipos de proteínas que estão envolvidos nesse processo podem ser observados no quadro 1.

Quadro 1. Funções e exemplos de proteínas de transporte extra e intracelular.

Tipos/Proteína	Funções	Exemplos
Canais	Realizam transporte passivo com base no gradiente eletroquímico	Porinas, canais de difusão facilitada
Transportadores ativos primários	Utilizam ATP para movimentar íons contra o gradiente	ATPases do tipo P, transportadores ABC
Transportadores secundários	Dependem da força eletromotriz da membrana	CDF, Nramp, MFS

Fonte: (AL-AMIN et al., 2021 – Adaptado).

Após o ingresso no citoplasma, quando em excesso os metais pesados são rapidamente complexados por moléculas quelantes, fundamental para sua sequestração e detoxificação. Dentre os principais agentes quelantes destacam-se as metalotioneínas, proteínas ricas em resíduos de cisteína que formam complexos estáveis com íons como Cd^{2+} , Zn^{2+} e Pb^{2+} , reduzindo sua toxicidade; as fitoquelatinas, peptídeos derivados da glutatona com alta afinidade por metais, formando complexos insolúveis; e os polifosfatos, polímeros inorgânicos com capacidade quelante inespecífica, que também atuam na regulação iônica. Todo este processo é resumido e simplificado em um esquema observado na figura 1.

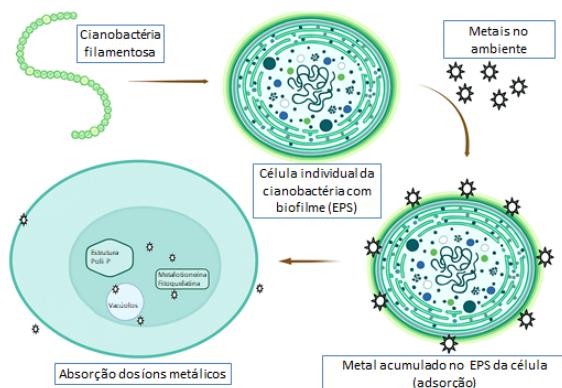


Figura 1: Esquema geral do processo de biorremediação dos metais pesados em cianobactérias
Fonte: KALITA; BARUAH, 2023 – Adaptado.

4.1. Exopolissacarídeos (EPS)

De acordo com Al-Amin et al. (2021) e Kalita e Baruah (2023), as cianobactérias sintetizam polímeros extracelulares compostos predominantemente por polissacarídeos e proteínas, representando de 70% a 90% da biomassa extracelular. Esses biopolímeros podem aderir à parede celular formando cápsulas, bainhas ou biofilmes, ou ainda ser secretados como substâncias solúveis.

Sua composição inclui monossacarídeos como glicose, xilose, ramnose e ácido galacturônico. A presença de grupos funcionais como ácidos urônicos e açúcares sulfatados contribui para a carga negativa dos EPS, favorecendo a ligação com metais catiônicos. A diversidade estrutural desses compostos influencia diretamente sua eficácia na captura de íons metálicos. A síntese de EPS é frequentemente induzida por condições adversas, como exposição a metais pesados, variações de pH e estresse osmótico (ATES, 2015).

4.2. Metalotioneínas (MT)

As metalotioneínas constituem um grupo de proteínas de baixo peso molecular, ricas em resíduos de cisteína, responsáveis por complexar metais pesados por meio de interações com grupos sulfidrila (-SH). Essas proteínas estão presentes tanto em organismos procariontes quanto eucariontes, atuando na proteção celular contra a toxicidade de íons metálicos (YANG et al., 2024).

A estrutura das MTs varia entre espécies. Por exemplo, a proteína expressa pela *Synechococcus elongatus* PCC 7942 a qual tem uma estrutura bem definida por Blindauer et al., (2001) apresenta aproximadamente 17% menos resíduos de cisteína em comparação com as MTs de mamíferos, além de possuir histidinas na região de coordenação metálica, o que confere características estruturais e funcionais distintas.

4.3. Dados de Remoção de Metais Pesados por Cianobactérias

Com base nos dados apresentados por Kalita e Baruah (2023), observa-se que a capacidade de adsorção de metais pesados por diferentes espécies de cianobactérias varia significativamente tanto em função do metal quanto da espécie envolvida, isso pode ser observado no quadro 2. Esses resultados indicam que a eficiência de biossorção está diretamente relacionada tanto à espécie de cianobactéria quanto ao tipo de MP em questão, o que reforça a importância de estudos direcionados para a seleção de microrganismos específicos em processos de biorremediação.

Quadro 2. Concentração de metais pesados adsorvidos por cianobactérias.

Cianobactérias/MPs	Cd ²⁺ (mg. Kg ⁻¹)	Pb ²⁺ (mg. Kg ⁻¹)	Hg ²⁺ (mg. Kg ⁻¹)	Cr ¹⁺ (mg. Kg ⁻¹)
<i>Anabaena sphaerica</i>	111,1 mg	121,9 mg	-	-
<i>Phormidium sp</i>	9,6 mg	13,6 mg	-	-
<i>Oscillatoria limosa</i>	10,8 mg	16,4 mg	17,2 mg	-
<i>Synechococcus elongatus</i> PCC 7942	7,2 mg	30,4 mg	-	5,4 mg

Fonte: KALITA; BARUAH, 2023 – Adaptado.

Adicionalmente, o estudo de Al-Amin et al. (2021), também fornece dados no que tange a eficiência e remoção por bioacumulação na cianobactéria *Synechococcus elongatus* PCC 7942 que apresenta uma eficiência de remoção de 50%, 45% e 34% para mercúrio, chumbo e cádmio bivalentes respectivamente.

4.4. Considerações Gerais sobre os Mecanismos de Biorremediação e os Potenciais para Modelagem Molecular

Os exopolissacarídeos (EPS) são importantes na captura extracelular de metais devido à sua carga negativa e grupos funcionais presentes como os carboxílicos e sulfatos, mas apresentam limitações como à falta de uma estrutura tridimensional bem definida e incapacidade de reduzir os metais a formas menos tóxicas com eficiência, o que restringe sua aplicação em modelagem molecular e processos completos de detoxificação.

Por outro lado, as MTs atuam intracelularmente e apresentam alta especificidade na complexação de íons metálicos, com a vantagem adicional de serem capazes de reduzir sua toxicidade por meio da formação de complexos estáveis. O estudo de Blidauer et al. (2001) é particularmente relevante nesse contexto, pois apresenta uma estrutura tridimensional detalhada de uma MT da *Synechococcus elongatus PCC 7942* complexada com íons de zinco, o que abre perspectivas promissoras para a aplicação desses dados em modelagens moleculares e no design racional de estratégias bioinspiradas para biorremediação.

5. CONCLUSÕES

Em suma, as cianobactérias demonstram grande potencial em processos de biorremediação de metais pesados, especialmente devido à presença de biomoléculas como os EPSs e MTs. Enquanto os EPSs oferecem um meio eficaz de adsorção, as MTs destacam-se por possibilitar a complexação e detoxificação intracelular. O estudo de Blidauer et al. (2001), ao fornecer uma estrutura tridimensional de metalotioneína, representa um avanço significativo para futuras simulações de modelagem molecular, que podem aprimorar o desenvolvimento de tecnologias bioinspiradas para remediação ambiental.

6. AGRADECIMENTOS

Agradeço ao CNPq pela bolsa de iniciação científica, ao CETEM pela infraestrutura e aos colegas do LABMOL pelo suporte.

7. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- AL-AMIN, A. et al. Cyanobacteria mediated heavy metal removal: a review on mechanism, biosynthesis, and removal capability. *Environmental Technology Reviews*, v.10, n.1, p.44-57, 2021.
- ATES, O. Systems Biology of Microbial Exopolysaccharides Production. *Frontiers in Bioengineering and Biotechnology*, v.3, art.200, 2015.
- BLINDAUER, C.A. et al. A metallothionein containing a zinc finger within a four-metal cluster protects a bacterium from zinc toxicity. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, v.98, n.17, p.9593–9598, 2001.
- JOMOVA, K.; ALOMAR, S.Y.; NEPOVIMOVA, E. et al. Heavy metals: toxicity and human health effects. *Archives of Toxicology*, v.99, p.153-209, 2025.
- KALITA, N.; BARUAH, P.P. Cyanobacteria as a potent platform for heavy metal biosorption: uptake, responses and removal mechanisms. *Journal of Hazardous Materials Advances*, v.11, p.100349, 2023.

PESSÔA, F.K. et al. Missão Institucional Tecnologia Mineral Série: revisão de alguns principais métodos utilizados em modelagem molecular – Parte I: Mecânica Molecular. [S.l.]: [s.n.], 2018.

SENTHAMILSELVI, Dhandapani; ANANDAKUMAR, Selvaraj; KALAISELVI, Thangavel. Bioremediation of heavy metals contaminated soils using cyanobacteria. Bio-organic Amendments for Heavy Metal Remediation, v.[s.n.], p.349-356, 2024.

YANG, Ruoqiu et al. Metallothionein: a comprehensive review of its classification, structure, biological functions, and applications. Antioxidants, v.13, n.7, p.825, 2024.