

Estudo da cinética de formação de uma betalaína anfifílica em metanol

Caroline O. Machado (IC)*, Barbara C. Freitas (IC) e Erick L. Bastos (PQ)

Instituto de Química, Universidade de São Paulo, Avenida Professor Lineu Prestes, 748 – bloco 04 Sup. – CEP 05508-000 - São Paulo – SP, Brasil, caroline.machado@usp.br

Palavras Chave: *betalaínas, tensoativos verdes e semissíntese.*

Introdução

O desenvolvimento de compostos químicos para substituição de materiais derivados do petróleo tem grande importância econômica e ecológica. Tensoativos são substâncias anfifílicas capazes de diminuir a tensão superficial e interfacial e que, por isso, tem diversas aplicações em, por exemplo, alimentos, cosméticos e fármacos. Grande parte dos tensoativos de interesse industrial tem origem petroquímica. Entretanto, diversas fontes renováveis têm sido utilizadas para a obtenção de matéria primas para a sua síntese, incluindo aminoácidos.¹

Betalaínas são pigmentos naturais da classe dos alcaloides que podem ser modificados quimicamente. Betalaínas anfifílicas podem ser uma opção de novos tensoativos biocompatíveis e podem ser semissintetizadas a partir do acoplamento entre aminas graxas com o ácido betalâmico, uma biomolécula derivada da tirosina que pode ser obtida a partir da hidrólise alcalina de betalaínas naturais.²

Resultados e Discussão

A semissíntese de uma betalaína artificial derivada da betilamina foi feita através da reação entre ácido betalâmico e butilamina em metanol como solvente e na presença de ácido *p*-toluenossulfônico como catalisador ácido. Os experimentos foram feitos à temperatura ambiente em cubetas de quartzo e com um volume final de solução de 2 mL. A cinética de reação foi monitorada através de espectroscopia de absorção na região UV-Vis.

Os experimentos foram feitos em condições de pseudo-primeira ordem utilizando-se um excesso de amina de 100, 500, 750 ou 1000 equiv. em relação ao ácido betalâmico (**Figura 1**). Para o cálculo da concentração de ácido betalâmico, utilizou-se um coeficiente de absorção molar em 424 nm de $3,0 \times 10^4 \text{ L mol}^{-1} \text{ cm}^{-1}$.³ O produto desta reação apresenta absorção máxima na região do azul, característica das betaxantinas ($\lambda \sim 470 \text{ nm}$). De maneira geral, observou-se nos espectros de absorção das cinéticas reacionais a formação de uma banda com dois picos na região de 450 nm e 470 nm. Com exceção do teste realizado com 100 equivalentes com a butilamina foi observado um maior crescimento, com o tempo, na intensidade de absorbância em 470 nm, ultrapassando o valor máximo de absorbância em 450 nm (conversão entre os máximos de absorção).

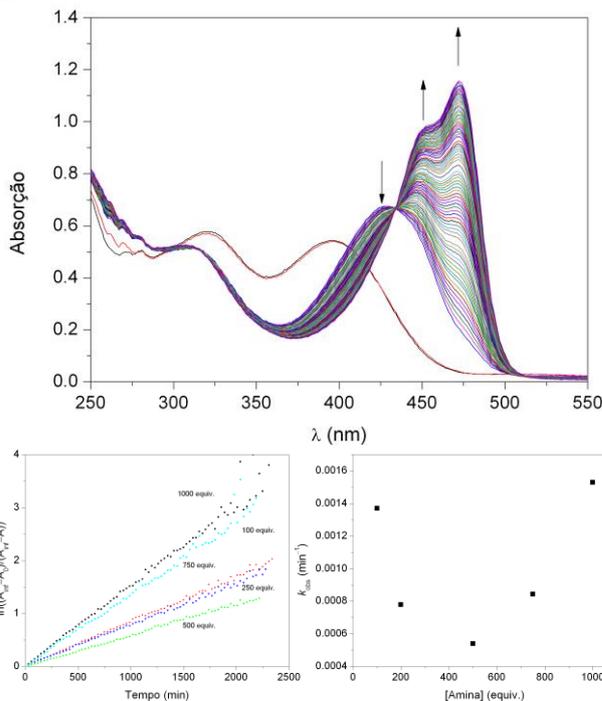


Figura 1. Espectro de absorção da reação de ácido betalâmico com 500 equiv. de butilamina monitorado por 2100 min., cinética de formação de produto monitorado em 490 nm e constante cinética vs. concentração de amina.

Embora ocorra a formação de produtos em todas as concentrações de amina estudadas, a constante cinética observada apresenta um perfil parabólico com a concentração de amina, sendo o valor mínimo observado com 500 equiv. do reagente. Isso impossibilitou a obtenção da constante bimolecular e pode estar relacionado ao efeito da concentração de amina sobre o equilíbrio de formação da betalaína.

Conclusões

A cinética de formação de produto é complexa e constante cinética de primeira ordem tem uma dependência parabólica com a concentração de amina.

Agradecimentos

Ao CNPq (COM, 800377/2013-3, ELB, 304094/2013-7) e à FAPESP (ELB 2011/23036-5).

¹ Moran, M. C. *et al.*, *Green Chem.* **2004**, *6*, 233.

² Schliemann, W *et al.*, *Plant Physiol.* **1999**, *119*, 1217.

³ Stintzing, F. C. *et al.*, *Eur. Food Res. Technol.* **2003**, *216*, 303.