

Estudo espectroscópico da influência de diferentes solventes no perfil Raman da bixina

Isabela M. R. Rimulo (IC)^{1*}, Lenize F. Maia (PQ)^{1*}, Vanessa E. de Oliveira (PQ)^{2*}, Luiz A. S. Costa (PQ)¹, Luiz F. C. de Oliveira (PQ)¹

¹ NEEEM - Núcleo de Espectroscopia e Estrutura Molecular – Departamento de Química – ICE – Universidade Federal de Juiz de Fora, Juiz de Fora – MG, 36036-900. ² Departamento de Ciências da Natureza, IHS – Universidade Federal Fluminense, Campus de Rio das Ostras – Rio das Ostras – RJ, 28890-000. *isabelarimulo93@gmail.com

Palavras Chave: Bixina, Espectroscopia Raman; Interação soluto-solvente.

Introdução

Os corantes estão cada vez mais presentes nos alimentos que consumimos; entretanto, a divulgação quanto aos efeitos nocivos destas substâncias tem promovido o aumento da demanda por pigmentos naturais, gerando assim um crescente interesse pelos produtos provenientes do urucum, cujo pigmento principal é o carotenoide bixina¹. Carotenoides são pigmentos amplamente distribuídos em vegetais, animais, microorganismos e que proporcionam grandes benefícios à saúde devido à sua atividade antioxidante e anticancerígena². Suas características cromofóricas devem-se à presença de insaturações conjugadas em sua estrutura atuando como absorvedores de radiação eletromagnética atribuindo-lhes colorações que vão do amarelo ao vermelho³. A bixina, de cor avermelhada, pode ser encontrada tanto na conformação *cis*, que é componente majoritário da semente do urucum, quanto na *trans*, mais comum após o pigmento ser submetido a processos térmicos³, Figura 1.

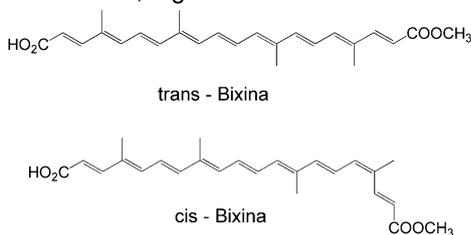


Figura 1. Estruturas moleculares da *trans* e *cis* - bixina.

Este estudo tem como objetivo obter informações espectroscópicas através de alterações no perfil do espectro Raman de soluções de bixina extraída do urucum com alguns solventes de diferentes polaridades, buscando correlacionar tais dados com suas estruturas eletrônicas.

Resultados e Discussão

O extrato de bixina foi obtido a partir da semente de urucum, seguindo a literatura⁴. Os espectros Raman foram obtidos em espectrômetro FT Raman com excitação em 1064 nm. Os dados espectrais foram comparados com valores das bandas obtidos através de cálculos teóricos [DFT B97D/6-311G(d,p)].

O extrato da bixina apresentou três bandas características em 1520, 1155 e 1012 cm^{-1} , atribuídas aos modos $\nu_1(\text{C}=\text{C})$, $\nu_2(\text{C}-\text{C})$, $\rho_3(\text{CCH}_3)$, respectivamente. A correlação entre os modos vibracionais e a polaridade (constante dielétrica) dos solventes utilizados encontra-se

na Figura 2. Os solventes de menor polaridade promoveram deslocamentos da banda referente ao modo ν_1 para menores números de onda (Figura 2).

Assim, pode-se inferir que a mudança de ambiente químico gera um enfraquecimento do modo ν_1 devido à interação da bixina com o solvente. Os maiores deslocamentos da banda atribuída ao modo $\nu_1(\text{C}=\text{C})$ são encontrados para as soluções em acetonitrila e nitrometano, respectivamente. Sugere-se assim que a interação bixina/solvente deve ser mais efetiva na presença desses dois solventes devido à grande polaridade dos mesmos, influenciando fortemente a nuvem eletrônica do pigmento e, portanto, sua estrutura e as vibrações. Cálculos teóricos da estrutura eletrônica reforçam tal observação espectroscópica, onde o modo ν_1 aparece como a mais deslocada, em solução de acetonitrila.

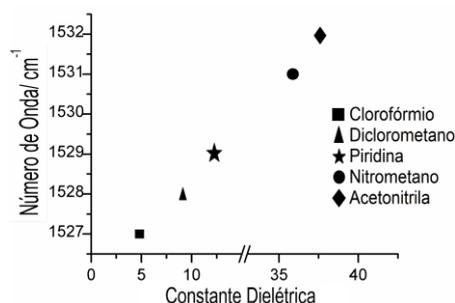


Figura 2. Correlação entre o número de onda e constante dielétrica de diferentes solventes.

Os demais modos característicos do carotenoide (ν_2 e ρ_3) não sofreram nenhuma influência significativa com a alteração do ambiente químico, provavelmente devido a um efeito de blindagem promovido pelos elétrons pi da cadeia insaturada.

Conclusões

A espectroscopia Raman se mostrou eficiente para o estudo sobre mudanças no comportamento de carotenoides em diferentes ambientes químicos. O modo ν_1 se mostrou um excelente marcador espectroscópico para investigação preliminar sobre possíveis alterações conformacionais em sua estrutura molecular.

Agradecimentos

CNPq, CAPES, FAPEMIG.

¹ Costa, C.L.S.; Chaves, M.H. *Quim. Nova* **2005**, *28*, 149.

² Rios, A.D.O.R.; Em Química de Alimentos de Fennema. 4 ed. Porto Alegre, RS, 2010, p.463.

³ Schaffer, H.E. et al. *J. Chem. Phys.*, **1991**, *94*, 4161.

⁴ Rios, A. D. O. R.; Mercadante, A. Z. *Alim. Nutr.*, **2014**, *15*, 203.