

## Análise das amidas de serotonina presentes no café por cromatografia em fase gasosa acoplada à espectrometria de massas.

**Iris G.S. Moreira**<sup>1\*</sup> (PG), **Fábio J. M. Novaes** (PG)<sup>1</sup>, **Jenilce R. Martins** (PG)<sup>2</sup>, **Débora A. Azevedo** (PQ)<sup>1</sup>, **Claudia M. Rezende** (PQ)<sup>1</sup>.

<sup>1</sup>Universidade Federal do Rio de Janeiro – Instituto de Química. \*irisgsm.1987@yahoo.com.br

<sup>2</sup>Instituto Militar de Engenharia – Rio de Janeiro

Palavras Chave: Café, amidas de serotonina, CG-EM.

### Introdução

As amidas de serotonina (C5HT), ou *N*<sup>β</sup>-alcanoil-5-hidroxitriptaminas, estão presentes na cera do café, em torno de 0,2-0,3% do peso total do grão cru. O conteúdo total de C5HTs em cafés arábica é da ordem de 500-2370 mg.kg<sup>-1</sup>, e em cafés robusta 565-1120mg.kg<sup>-1</sup>.<sup>1</sup> São relatadas na literatura científica como potencializadores de problemas gástricos relacionados ao café.<sup>2</sup> As C5HTs são comumente extraídas por metanol ou THF e analisadas por CLAE e CCF. Uma nova metodologia de análise das C5HTs foi desenvolvida por cromatografia em fase gasosa com pulso de pressão e espectrometria de massas, mostrando-se simples e robusta para a análise de compostos de volatilidade reduzida presentes no café.

### Resultados e Discussão

Para avaliar a viabilidade da análise das C5HTs por cromatografia em fase gasosa, foi sintetizado o padrão de *N*<sup>β</sup>-palmitoil-5-hidroxitriptamina através do método descrito por Lang et al.<sup>1</sup> O produto teve sua estrutura confirmada por RMN <sup>1</sup>H e <sup>13</sup>C e por CG-qEM, onde os íons *m/z* 146 (C<sub>9</sub>H<sub>8</sub>NO), 147 (C<sub>9</sub>H<sub>9</sub>NO), 159 (C<sub>10</sub>H<sub>9</sub>NO), 161 (C<sub>10</sub>H<sub>11</sub>NO), corroboraram a estrutura. Verificou-se que as condições usuais de injeção cromatográfica por split/splitless e colunas capilares comumente empregadas na CG, como 30m x 0,25mm x 0,25µm, não permitiram a visualização dos sinais cromatográficos referentes à mesma. Assim, devido às evidências de termolabilidade, optou-se por usar o modo de injeção com pulso de pressão, a fim de evitar a degradação no injetor. Para a análise foi utilizada uma coluna DB1 10m x 0,25mm x 0,25µm, no modo de detecção por SCAN no CG-EM. Em seguida, esta metodologia foi aplicada a extratos de cafés arábica brasileiros, onde pode-se verificar a presença das 3 amidas de serotonina mais abundantes, dentre elas a *N*-araquidonoil-5-hidroxitriptamina, *N*-behênil-5-hidroxitriptamina e *N*-lignoceroil-5-hidroxitriptamina. (Figura.3), cujo a análise foi realizada por monitoramento seletivo de íons (MSI), para uma melhor análise dessas substâncias.

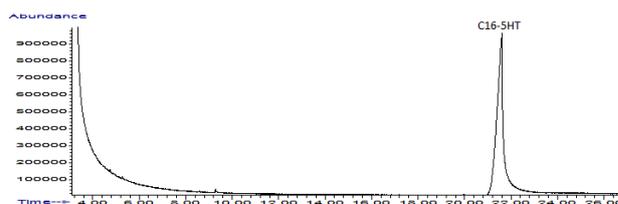


Figura 1. Cromatograma do padrão *N*<sup>β</sup>-palmitoil-5-hidroxitriptamina.

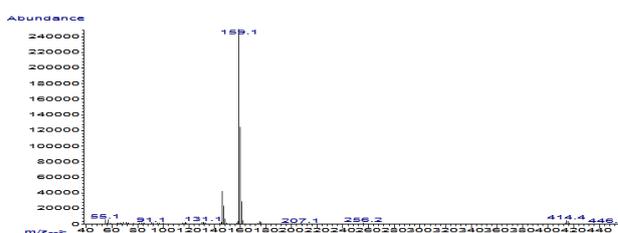


Figura 2. Espectro de massas do padrão sintetizado *N*<sup>β</sup>-palmitoil-5-hidroxitriptamina, com pico base *m/z* 159.



Figura 2. Cromatograma do extrato de café arábica analisado pelo modo MSI.

### Conclusões

As análises realizadas por cromatografia em fase gasosa acoplada à espectrometria de massas, utilizando o modo de injeção com pulso de pressão, mostrou-se eficiente para a análise das amidas de serotonina presentes no café. A CG-EM, favoreceu a identificação dessas substâncias em extratos de cafés através dos fragmentos característicos das amidas de serotonina.

### Agradecimentos

CNPq, FAPERJ, CAPES e PGQu.

<sup>1</sup>Nebesny, E.; Budryn, G. Food. 2002, 46, 279-282.

<sup>2</sup>Lang, R.; Hofmann, T. Eur Food Res Technol. 2005, 220, 638-643.