

Modelagem da relação entre propriedades eletrônicas moleculares e o sabor doce de derivados do ácido 2-benzoilbenzóico.

Alexandre Araújo de Souza* (PQ), Astrogildo Rodrigues Alves (PG).

alesouza@ufpi.br

Universidade Federal do Piauí – CCN – Departamento de Química – Campus da Ininga – 64049-550 – Teresina - PI.

Palavras Chave: *ab initio*, edulcorante, estatística multivariada, modelagem, regressão linear múltipla, semiempírico.

Introdução

Os edulcorantes são aditivos que conferem sabor doce aos alimentos. Este é percebido como resultado de interações específicas entre a molécula do edulcorante (substrato) e uma proteína (receptor) presente nas papilas gustativas. A teoria mais aceita para explicar a recepção do sabor doce em humanos foi desenvolvida por Tinti e Nofre¹. Ela considera a existência de oito pontos na molécula do substrato, capazes de interagir com sítios específicos do receptor. Arnoldi et al.² efetuaram um estudo, através de análise de componentes principais, da relação entre sabor (doce ou insípido) e propriedades moleculares de derivados do ácido 2-benzoilbenzóico (Figura 1). O presente trabalho consiste na modelagem da relação entre sabor e propriedades eletrônicas moleculares de dezesseis derivados do ácido 2-benzoilbenzóico, através de regressão linear múltipla. As propriedades moleculares foram calculadas através de métodos *ab initio* (HF/6-31G*) e semiempíricos (AM1 e PM3), utilizando o pacote computacional TITAN. A estatística multivariada foi efetuada com o auxílio do pacote computacional SPSS.

Resultados e Discussão

Os parâmetros eletrônicos calculados foram: o calor de formação (CF), a energia dos orbitais de fronteira (HOMO e LUMO), o momento dipolar elétrico (MD), o volume de van der Waals (vdW) e as cargas atômicas de Mulliken sobre os carbonos C10, C11 e C12 (vide Figura 1).

Realizou-se uma análise de componentes principais obtendo variância, para as três componentes principais, de 78,78% e 72,04% para os métodos semiempíricos AM1 e PM3, respectivamente, e 76,02% para o método *ab initio* Hartree-Fock com função de base 6-31G*. Utilizou-se a análise hierárquica por agrupamento e observou-se que vdW, C12 e MD não se correlacionam entre si, praticamente para os três métodos. A regressão linear múltipla foi feita com várias combinações entre as variáveis e observou-se que a melhor correlação linear foi obtida para o método semiempírico PM3, para as variáveis C12, MD e vdW.

O coeficiente de correlação linear (Pearson) obtido foi $r = 0,812$, com teste $F = 7,732$ e significância $p = 0,004$, obtendo-se a seguinte equação linear com a variável dependente:

$$Y = 7,537 - 3,593 \times 10^{-2} (\text{vdW}) + 4,151 (\text{C12}) + 0,829 (\text{MD})$$

De acordo com a convenção adotada de que $Y < 0$ significa substância insípida e $Y > 0$, substância doce, pôde-se observar que houve poucas discrepâncias entre os valores previstos e os dados experimentais de sabor das substâncias. De forma geral, todos os modelos deram resultados satisfatórios, sendo que o método PM3 forneceu as melhores previsões.

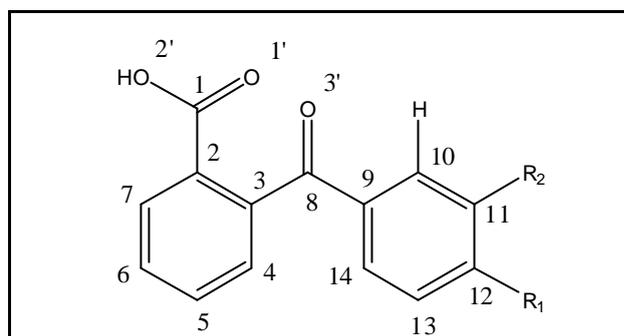


Figura 1. Derivados do ácido 2-benzoilbenzóico.

Conclusões

Na modelagem, obteve-se um resultado satisfatório, considerando que se pôde explicar a relação de doçura das moléculas com apenas três parâmetros moleculares. Em relação aos modelos propostos, aquele em que se utilizou o método semiempírico PM3, mostrou-se o mais adequado, pois conseguiu prever a doçura de uma quantidade maior de substâncias.

Agradecimentos

Agradecemos à UFPI.

¹ Nofre, C. e Tinti, J. M. *Food Chem.* **1996**, 56, 263.

² Arnoldi, A.; Bassoli, A.; Borgonovo, G.; Merlini, L. e Morini, G. J. *Agric. Food Chem.* **1997**, 45, 2047.