Caracterização Espectroscópica e Cálculos Teóricos do Corante Alimentício E124 (Ponceau 4R).

Mariana Ramos de Almeida[1](IC)*, Rodrigo Stephani[2](PQ), Hélio F. dos Santos[3](PQ), Luiz Fernando Cappa de Oliveira[1](PQ)

***mariquimica49@yahoo.com.br**

[1]*Núcleo de Espectroscopia e Estrutura Molecular (NEEM). Departamento de Química, Universidade Federal de Juiz de Fora, Juiz de Fora – MG.*

[2] *Gemacom Comércio e Serviços LTDA, Juiz de Fora, MG.*

[3]*Núcleo de Estudos em Química Computacional (NEQC), Departamento de Química, Universidade Federal de Juiz de Fora, Juiz de Fora – MG.*

Palavras Chave: *E124, Tautomerismo, Espectroscopia, cálculos teóricos.*

Introdução

E124 (Ponceau 4R ou Food Red 7, sal trissódico do ácido 1-(4-sulfo-1naftilazo)-2-naftol-7, 9-dissulfônico) é um corante artificial utilizado pela indústria alimentícia para oferecer coloração vermelha aos alimentos. Os grupamentos $SO_3^-Na^+$ presentes aumentam a solubilidade do corante em água e o grupo hidroxila orto ao grupo azo (-N=N-) possibilita a molécula de coexistir em duas formas tautoméricas distintas, os tautômeros azo (OH) e hidrazo (NH), representados na Figura 1.

Neste trabalho é apresentada a caracterização da molécula do corante E124 através das espectroscopias vibracional (IV e Raman), eletrônica (UV-visível) e de RMN de ^{13}C. Os cálculos teóricos foram essenciais para interpretação dos resultados experimentais, fornecendo importantes informações sobre a estrutura e propriedades do corante.

Resultados e Discussão

Através da otimização das geometrias para os tautômeros OH e NH, obteve-se a distância da ligação –N=N- da forma OH (1,24 Å) e a distância da ligação –N-N- da forma NH (1,30 Å). A pequena diferença observada entre estas duas formas tautoméricas deve se refletir em seus respectivos espectros vibracionais, com valores de freqüências N=N e N-N próximas. O cálculo da energia de Gibbs mostra o favorecimento do equilíbrio tautomérico para a forma NH (Figura 1).

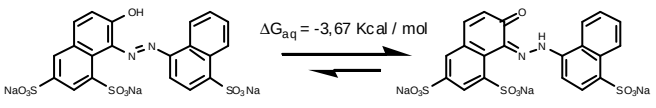

Figura 1. Estrutura e equilíbrio tautomérico das formas azo (OH) e hidrazo (NH) da molécula do corante E124.

Comparando os espectros vibracionais teóricos (IV e Raman) das formas OH e NH com os espectros experimentais, observa-se a presença de modos característicos da forma NH, como δ(N-H) em 1575 cm^{-1}, ν(C=O), δ(N-H), ν(C=N) na região de 1515-1554 cm^{-1} e ν(N-N) na região de 1301 cm^{-1}. O modo ν(N=N), característico da forma azo (calculado em 1468 cm^{-1}), não foi observado no espectro vibracional experimental.

Os espectros eletrônicos (teórico e experimental) mostram o máximo de absorção na região do visível referente à deslocalização de carga por toda molécula ($\pi \rightarrow \pi^*$). No espectro teórico, o máximo de absorção do tautômero OH (469 nm) foi observado numa região de maior energia do que o tautômero NH (492 nm). O espectro eletrônico experimental indica a presença da forma NH em solução com o máximo de absorção observado em 517 nm. O perfil eletrônico sugere ainda uma contribuição de ambos os tautômeros (zwitterion) na solução do corante.

No espectro de RMN de ^{13}C verifica-se um sinal em 196 ppm, atribuído à carbonila, presente apenas na estrutura da forma hidrazo (NH); este resultado é condizente com o valor de deslocamento químico calculado para esta forma tautomérica.

Conclusões

Os espectros vibracionais e eletrônicos, bem como os valores de deslocamento químico no espectro de RMN de ^{13}C (teóricos e experimentais) indicam fortemente que o equilíbrio tautomérico está mais deslocado para a forma hidrazo.

Agradecimentos

GEMACOM, CNPq, FAPEMIG.

[1] Dos Santos, H. F.; de Oliveira, L. F. C.; Dantas, S. O.; Santos, P.S.; De Almeida, W. B. *Int . J. Quantum Chem.* **2000,** *80*, 1076.

[2] Abbott, L. C.; Batchelor, S. N.; Oakes, J.; Gilbert, B. C.; Whitwood, A. C.; Smith, J.R.; Moore, J. N. *J. Phys. Chem. A* **2005** , *109*, 2894.