

## Efeito do pH sobre as propriedades fotofísicas de uma betalaína fenólica semissintética

Fernando H. Bartoloni\* (PQ), Nathana B. Lopes (IC), Leticia Christina P. Gonçalves (PG) e Erick L. Bastos (PQ)

*fernando.bartoloni@ufabc.edu.br*

Centro de Ciências Naturais e Humanas, Universidade Federal do ABC. Av. do Estado, 5001 – Bloco B, L201. 09210-170 Santo André, SP, *erick.bastos@ufabc.edu.br*.

Palavras Chave: ácido betalâmico, betalaínas, semi-síntese, hidrólise.

### Introdução

A obtenção de betalaínas semissintéticas não naturais pode ser alcançada através do acoplamento entre aminas e o ácido betalâmico, esse último obtido a partir da hidrólise alcalina do suco de beterraba.<sup>1</sup> Novas betalaínas com altos coeficientes de absorção molar e rendimentos quânticos de fluorescência têm aplicações como corantes e pigmentos. Ainda, a presença de um sistema 1,7-diazaeptametínico proporciona atividade antirradicalar.

Entretanto, a hidrólise dessas substâncias é a principal via de sua decomposição, sendo que tal reação está intimamente ligada ao pH do meio. Este trabalho apresenta o estudo da dependência do pH do meio com o perfil de absorção UV/Vis de betafenol.

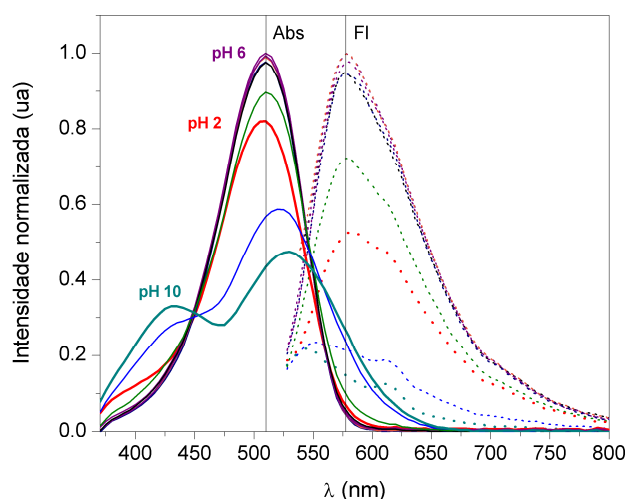
### Resultados e Discussão

Betafenol ( $[M+H]^+$  m/z = 303,1,  $\lambda_{\max} = 510$  nm) foi preparada pela reação de 2-aminofenol com ácido betalâmico e purificada por cromatografia de fase reversa em coluna C18, utilizando misturas água/metanol como eluente. A solução obtida foi concentrada em rotoevaporador e a concentração dessa betalaína determinada por absorção ( $\epsilon_{520} = 75.100 \text{ M}^{-1} \text{ cm}^{-1}$ ). Para evitar a sua decomposição, a betafenol foi mantida em banho de gelo e na ausência de luz.

O tampão Britton-Robinson foi utilizado para medidas em pH entre 2 e 10. Em uma cubeta de quartzo para absorção com caminho óptico de 1 cm contendo o tampão com pH definido, foi adicionada a solução de betafenol ( $[\text{estoque}] = 6,7 \cdot 10^{-4} \text{ mol L}^{-1}$ ) e registrou-se o espectro de absorção entre 300 e 800 nm. Observou-se a redução da absorção em 510 nm junto a formação do ácido betalâmico ( $\lambda_{\max} = 430$  nm) com o aumento da alcalinidade do meio, acompanhada de um deslocamento batocrômico em pH > 9 (Figura 1). Em meio ácido pH = 2 se observou o deslocamento hipsocrômico da banda de absorção. A formação do ácido betalâmico foi mais acentuada para valores de pH > 8 indicando a hidrólise alcalina da betafenol. Betafenol é pouco

fluorescente; contudo, observa-se aumento da intensidade de fluorescência variando-se o pH de 2 a 7. Em meio alcalino pH > 8 a fluorescência diminuiu em decorrência da hidrólise da betalaína.

Determinou-se o  $pK_a = 8,6$  para a porção fenólica da betafenol, através dos valores de absorbância em função do pH para a hidrólise da mesma.



**Figura 1.** Efeito do pH sobre a intensidade normalizada de absorção (Abs) e fluorescência (FI) da betafenol. Foi aplicado um filtro Savitzky-Golay (20 pts, 2ª ordem) nos espectros de fluorescência.

### Conclusões

Preparamos uma betalaína não natural que contém uma porção fenólica, a betafenol, sendo que seu coeficiente de absorção molar é maior do que o da betanina ( $65.000 \text{ M}^{-1} \text{ cm}^{-1}$ , o maior dentre as betalaínas). A mesma é sensível à hidrólise alcalina e sua porção fenólica tem valor de  $pK_a = 8,6$ .

### Agradecimentos

FAPESP (E.L.B., 07/00684-6; L.C.P.G., 07/59407-1; F.H.B., 10/16082-8); à UFABC pela infraestrutura.

<sup>1</sup> Strack, D.; Vogt, T.; Schliemann, W. *Phytochemistry* **2003**, *62*, 247.