

## SÍNTESE DE ÉSTERES PARA USO COMO PADRÕES NA IDENTIFICAÇÃO DE COMPONENTES DO AROMA DE FRUTAS

Elisa S. Ferreira\*(IC)<sup>1,4</sup>, Ingrid C. R. Costa (PG)<sup>2</sup>, Ivana R. C. Leal<sup>3</sup> (PQ), Selma Gomes F. Leite<sup>2</sup>(PQ), Leandro S. M. Miranda (PQ)<sup>1</sup>, Rodrigo O. M. A. de Souza (PQ)<sup>1</sup>, Humberto R. Bizzo (PQ)<sup>4</sup>.

\*elisa@bossgroup.com.br

<sup>1</sup>Universidade Federal do Rio de Janeiro, Instituto de Química, Departamento de Química Orgânica,<sup>2</sup>Universidade Federal do Rio de Janeiro, Escola de Química,<sup>3</sup>Faculdade de Farmácia, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Campus Macaé, Macaé-RJ,<sup>4</sup>Embrapa Agroindústria de Alimentos, Avenida das Américas, 29501, Rio de Janeiro – RJ.

Palavras Chave: Análise de aroma, síntese de ésteres, síntese de padrões, cromatografia gasosa.

### Introdução

O conhecimento das substâncias que compõem o aroma de um alimento fornece informações importantes para o processamento, desenvolvimento de novos produtos, práticas pós-colheita entre outras. Para a identificação das substâncias presentes nesses aromas, a técnica mais empregada é a cromatografia gasosa acoplada à espectrometria de massas<sup>1</sup>. Inúmeras coleções de espectros de massa foram elaboradas e comercializadas, nas quais o programa faz a identificação das substâncias por comparação (similaridade). No entanto, essas bibliotecas são limitadas<sup>2</sup>. A co-injeção de padrões é uma técnica bastante utilizada para contornar esses problemas. Mas inúmeros padrões não estão disponíveis comercialmente<sup>3</sup>.

Sendo assim o presente trabalho tem como objetivo realizar a síntese combinatória de ésteres voláteis para a elaboração de bibliotecas de padrões para a análise da composição dos aromas de frutas.

### Resultados e Discussão

Iniciamos esses estudos pela síntese dos cloretos de uma série homóloga de ácidos, do ácido acético ao ácido dodecanóico. Em banho de óleo e sob agitação, foi adicionado cloreto de tionila (8mL) sobre a mistura de ácidos, cerca de 400mg de cada ácido. Esse sistema reacional foi deixado durante 3h a 80 °C. Transcorrido o tempo reacional, a reação foi mantida a temperatura ambiente e em seguida rota-evaporada. No final deste processo, o material resultante foi colocado no alto-vácuo, para a completa eliminação dos compostos voláteis.

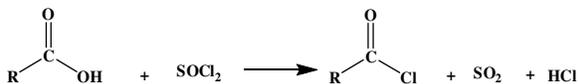


Figura 1: Síntese dos cloretos de ácidos.

A síntese dos ésteres foi realizada via reação dos cloretos de ácidos com diferentes álcoois (metanol ao 1-undecanol). Para o metanol e 2-propanol, por exemplo, as reações foram realizadas com 500mg da mistura do cloreto de ácido, 3,03g de Amberlite

400 CG e 10mL do álcool. As reações foram conduzidas em banho de gelo por uma hora. Após esse processo foram filtradas e uma alíquota da reação foi retirada e submetida à análise no CG-MS, Figura 2 e 3.

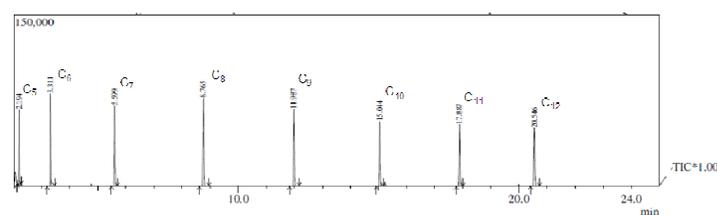


Figura 2: série homóloga do ésteres do metanol

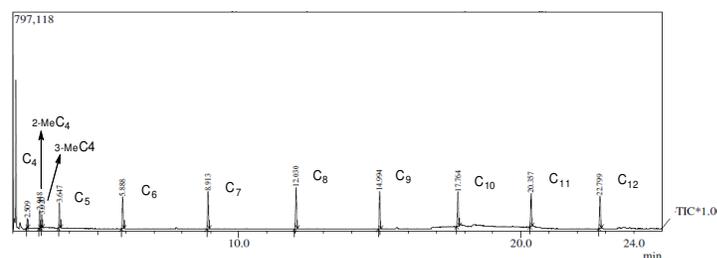


Figura 3: série homóloga do ésteres do 2-propanol

### Conclusões

Até o presente momento foi possível sintetizar as séries homologas dos ésteres dos seguintes álcoois: metanol, etanol, propanol, 2-propanol, 1-butanol, 2-butanol, isobutanol, 1-pentanol, 2-pentanol, 3-pentanol, isopentanol. O método utilizado para a síntese destes compostos mostrou-se eficiente.

Ao final da síntese será realizada a caracterização dos produtos sintetizados e elaboração da espectroteca dos produtos obtidos.

### Agradecimentos

CAPES, FAPERJ, CNPq, FINEP

<sup>1</sup>Gross, J. H. *Mass Spectrometry – A Textbook*, 2004, 218.

<sup>2</sup>Ausloos et al: *Journal of the American Society for Mass Spectrometry*, v. 10, 1999, 287-299

<sup>3</sup>ACS guide, *Journal of Agricultural and Food Chemistry*.