ANÁLISE DE AÇÚCARES ARTIFICIAIS POR ESPECTROSCOPIA NO INFRAVERMELHO: ABORDAGEM TEÓRICA E EXPERIMENTAL

LEAL, R. C. (IFRN/IQ-UNICAMP); SILVA, I. J. G. (IQ-UNICAMP); SOUSA, I. L. (IQ-UNICAMP)

Palavras Chave: FTIR, adoçante, DFT.

INTRODUÇÃO

Os adoçantes ou edulcorantes são frequentemente utilizados em produtos para o tratamento contra diabetes, excesso ou controle de peso.¹

Avanços computacionais permitem cada vez mais aliar teoria e prática, produzindo informações relevantes na identificação de estruturas moleculares e no entendimento de problemas de interesse químico. No presente trabalho obtivemos espectros FTIR experimental e teórico de diferentes adoçantes: sacarina, aspartame e sucralose.

METODOLOGIA

A análise dos padrões de adoçantes foi realizada em um espectrômetro de infravermelho em modo de reflectância total atenuada - ATR em um equipamento *Agilent Cary 630*, com resolução de 4 cm^{-1} , acumulado em 128 varreduras. Os espectros teóricos foram obtidos mediante cálculo de frequências vibracionais utilizando o *software Gaussian 09W*.²

RESULTADOS E DISCUSSÕES

Destacam-se, em ambos os espectros, os grupos funcionais característicos de cada açúcar analisado, Figura 1. Para a sacarina, nota-se uma concordância entre os valores das frequências vibracionais do grupo SO_2 ($1100\text{--}1200\text{ cm}^{-1}$). O aspartame apresenta uma banda característica em 1660 cm^{-1} e foram estimadas em aproximadamente 1726 cm^{-1} , correspondendo aos estiramentos simétricos no grupo amida. As deformações presentes no grupo éter foram estimadas entre $1020\text{--}1115\text{ cm}^{-1}$ para sucralose.

Figura 1 – Espectros FTIR teórico e experimental para sacarina, aspartame e sucralose.

CONCLUSÃO

Os espectros calculados podem fornecer informações complementares úteis na interpretação dos aspectos moleculares vibracionais desses sistemas, principalmente em casos nos quais a informação de dados experimentais seja escassa.

REFERÊNCIAS

- ¹TOZETTO, Adriana; DEMIATE, Ivo Mottin; NAGATA, Noemi. **Ciênc. Tecnol. Aliment.**, Campinas, v. 27, n. 4, p. 723-728, 2007.
- ²<http://www.gaussian.com>. Acessado em, agosto de 2016.