



*Ministério da Educação
Secretaria de Educação Profissional e Tecnológica
Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia de Goiás
Pró-Reitoria de Pesquisa e Pós-Graduação
Departamento de Pesquisa e Inovação*

Sensor Multivariado para a Identificação de Compostos Orgânicos

NOME DO BOLSISTA: Ana Luiza Fernandes da Costa

NOME DO ORIENTADOR: Fernando Schimidt

DATA DE INGRESSO COMO BOLSISTA (MÊS/ANO): setembro/2011

NOME DO CURSO: Licenciatura em Química

PERIODO QUE ESTÁ CURSANDO: 7º

É BOLSISTA DE RENOVAÇÃO: (X) SIM () NÃO

INHUMAS, AGOSTO DE 2012

1. Identificação do Projeto e Componentes

Título do Projeto: Sensor Multivariado para Identificação de Compostos Orgânicos

Bolsistas: Ana Luiza Fernandes da Costa/ Sarah Lorrany Trindade Ferreira

Orientador: Fernando Schimidt

Local de execução: Instituto Federal de Goiás – Câmpus Inhumas

Vigência: 01/09/2011 até 31/08/2012

2. Introdução

A língua eletrônica é um sistema analítico de baixo custo elaborado para identificação dos componentes presentes em solução podendo assim, identificar, classificar as substâncias de acordo com variações específicas da mesma, relacionado à sensibilidade sensorial, identificando as substâncias através de um painel de fácil diferenciação (LEGIN, 2011). Assim, o sensor multivariado é baseado na língua eletrônica e elaborado para a identificação de compostos orgânicos através da variação de cor e tonalidade, através de reagentes selecionados que correspondem às variações das reações para assim, diferenciar as substâncias desejadas.

Para a identificação de substâncias orgânicas, muitas especificidades devem ser consideradas, já que essas podem formar diversas reações, através de oxidação, matérias-primas ou produtos de decomposição (CEOLIN, 2009). Então, as substâncias orgânicas podem formar produtos diferentes de acordo com os grupos funcionais, sendo que isso pode ocorrer pela variação de cor ou tonalidade das mesmas, sendo o foco da pesquisa. Através disso, as reações formam cor ou tonalidade variada, especificando assim, os grupos funcionais e conseqüentemente os compostos orgânicos. As variações de cor podem ser analisadas na região do espectro podendo assim, relacionar as variações aos grupos orgânicos sensíveis a partir das reações de oxidação com os reagentes: Permanganato de potássio (KMnO_4), Cloreto férrico (FeCl_3) e Dinitrofenilhidrazina ou DNF ($\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_4\text{O}_4$), juntamente com dez aminoácidos, sendo estes: cistina; arginina; prolina; fenilalanina; tirosina; glicina; histidina; cisteína; triptofano e alanina, além de amostras de café.

Foram utilizados dez aminoácidos para a análise, esses são codificados pelo código genético, sendo, portanto componentes das proteínas dos seres vivos, além de apresentarem um grupo amino e um carboxílico ligado ao mesmo carbono. A Prolina é um dos aminoácidos cíclicos alifáticos que são componentes primários da proteína colágeno, o tecido do conectivo que liga e sustenta todos os outros tecidos. A prolina tem uma cadeia lateral alifática com fórmula molecular $\text{C}_5\text{H}_9\text{NO}_2$, mas difere dos demais aminoácidos pela sua cadeia lateral que está ligada a um átomo de

azoto e a um átomo de carbono. O triptofano possui um anel indólico ligado a um grupo metileno com fórmula molecular $C_{11}H_{12}N_2O_2$. A porção aromática do triptofano serve como um marcador ultravioleta para a detecção deste aminoácido tanto de forma separada, ou incorporado em proteínas e enzimas, através de espectrofotometria ultravioleta. A arginina com fórmula molecular $C_6H_{14}N_4O_2$ em proteínas tem um carácter anfipático, já que parte da sua cadeia lateral que é hidrofóbica, mas termina num grupo guanidina, que possui carga positiva na maioria das situações fisiológicas. A histidina é um dos aminoácidos básicos (em relação ao pH) devido à sua cadeia lateral aromática de azoto heterocíclico com fórmula molecular $C_6H_9N_3O_2$. A Glicina é bastante solúvel em água e ácido fórmico e praticamente insolúvel em etanol e é fabricada pela síntese química a partir de formaldeído ou ácido monocloroacético e amoníaco com fórmula molecular $C_2H_5NO_2$. A Tirosina é metabolicamente sintetizada a partir da fenilalanina com fórmula molecular $C_9H_{11}NO_3$, tornando-se seu derivado para-hidróxi, embora seja menos hidrófoba, sendo que muitas reações químicas colocam em evidencia a sua função servindo para dosear as proteínas nos líquidos biológicos (s.a., 2011). Já a fenilalanina é um aminoácido que faz parte da composição de todas as proteínas (animal e vegetal) com fórmula molecular $C_9H_{11}NO_2$. A cisteína possui um grupo tiol na sua cadeia lateral com fórmula molecular $C_3H_7NO_2S$ e é principalmente encontrado em proteínas e no tripéptido glutathiona. Já a cistina é um aminoácido natural com fórmula molecular $C_6H_{12}N_2O_4S_2$, formado pela dimerização da cisteína em condições oxidantes, que contém uma ligação entre dois átomos de enxofre, presente na urina e em cálculos biliares e renais e, sob forma combinada, em proteínas. A alanina é o nome comum para o ácido 2-aminopropanóico, com fórmula molecular $C_3H_7NO_2$. O grupo variável ligado ao carbono α , que distingue um aminoácido de outro, é neste caso um grupo metilo. Este grupo confere um carácter hidrofóbico à alanina, classificando-se esta como aminoácido alifático. Pela mesma razão, é estruturalmente um dos aminoácidos mais simples (s.a., 2011).

A análise de amostras de café se deve ao fato deste grão possuir além de uma grande variedade de minerais potássio (K), magnésio (Mg), cálcio (Ca), sódio (Na), ferro (Fe), manganês (Mn) e vários outros, aminoácidos como alanina, arginina, asparagina, cisteína, ácido glutâmico, glicina, histidina, isoleucina,

lisina, metionina, fenilalanina, prolina, serina, treonina, tirosina, valina; lipídeos como triglicerídeos e ácidos graxos livres, açúcares como sucrose, glicose, frutose, arabinose, galactose, maltose e polissacarídeos. A cafeína é uma substância termoestável, isto é, não é destruída com a torrefação excessiva. As demais substâncias, como aminoácidos, açúcares, lipídeos, niacina e os ácidos clorogênicos, são preservadas, formadas ou mesmo destruídas durante o processo de torra (LIMA, s.d.). Devido a essa variedade fizemos a análise das amostras de café comerciais e orgânicas. O café pode ainda possuir variações devido ao tempo de torrefação, produzindo diferentes tons de pó, dependendo das substâncias presentes.

Os reagentes utilizados com as amostras possuem características que variam de cor e tonalidade através de reações, que diferenciam as amostras. Assim, o permanganato de potássio é um agente oxidante forte que possui variações de cor e tonalidade diferenciada, sendo que as análises consistem na reação da solução de permanganato de potássio em meio aquoso com a ligação múltipla de um alqueno ou alquino. O teste é positivo se a solução violeta do íon permanganato se descora imediatamente com formação de precipitado marrom (MnO_2). Já o Cloreto férrico forma complexos coloridos com íon Fe^{3+} e a coloração varia do azul ao vermelho. O teste do cloreto férrico pode ser efetuado em água, metanol ou diclorometano. Entretanto, o teste não é positivo para todos os fenóis. Certos enóis também reagem positivamente. O teste com 2,4-dinitrofenil-hidrazina as reações ocorrem em meio ácido e formam 2,4-dinitrofenil-hidrazonas, usualmente como um precipitado de coloração amarelo-avermelhada. O produto tem, na maior parte dos casos, um ponto de fusão nítido, podendo facilitar a identificação a presença de aldeído ou cetona, formando um complexo nesses casos (CEOLIN, 2009).

As variações de cor das reações podem ser medidas por meio do tratamento de imagens obtidas com um scanner. Cada imagem possui pontos ou pixels em função da sua resolução que na definição de cores RGB, em que a cor possui três canais: R (vermelho), G (verde) e B (azul) e podem variar com índices inteiros entre 0 e 255, permitindo uma combinação de 256^3 (= 16.777.216) tonalidades em cada pixel. Assim, todas as variações de cor podem ser armazenadas como matrizes e tratadas matematicamente, demonstrando a sensibilidade do scanner e a importância de sua utilização (GODINHO, et. al., 2008).

3. Material e Métodos

3.1. Materiais

- Ácido clorídrico (HCl).

3.2. Amostras

- Cistina;
- Arginina;
- Prolina;
- Fenilalanina;
- Tirosina;
- Glicina;
- Histidina;
- Cisteína;
- Triptofano;
- Alanina;
- Café de diversas marcas.

3.3. Reagentes

- 2,4 Dinitrofenilhidrazina (2,4 DNF);
- Cloreto férrico (FeCl_3);
- Permanganato de potássio (KMnO_4).

3.4. Equipamentos e vidrarias

- Um Béquer (50 mL);
- Um Béquer (250 mL);
- Três Pipetas volumétricas (10 mL);
- Pipeta graduada;
- Três placas de petri;

- Erlemeyer;
- Proveta (100 mL);
- Chapa elétrica;
- Pêra;
- Balão volumétrico;
- Scanner;

Colocou-se em torno de 5 mL a 10 mL dos reagentes nas amostras e observou-se as variações de cor e tonalidade, analisando e identificando as substâncias através dessas variações, no qual baseou-se em referências bibliográficas e estudou-se os compostos orgânicos referentes as variações de acordo com os grupos funcionais, sendo esses fundamentais na identificação dos compostos orgânicos. Realizou-se diversas análises com as amostras estando essas enumeradas para facilitar a diferenciação dos aminoácidos, tais como: 1 – Prolina; 2 – Alanina; 3 – Cistina; 4 – Triptofano; 5 – Tirosina; 6 – Arginina; 7 – Histidina; 8 – Glicina; 9 – Cisteína; 10 – Fenilalanina e amostras de café, e colocou-se os reagentes, onde preparou-se os três segmentos das amostras para os três reagentes. Preparou-se as amostras diluídas em água com excessão do café sendo analisado sem alteração de como foi produzido.

Através disso, as variações de cor e tonalidade eram colocadas em placas de petri e observou-se no scanner as variações, sendo essas específicas para os compostos de acordo com a presença do grupo funcional ou da composição orgânica específica como também no caso das amostras de café. Diluí-se o reagente do cloreto férrico porque em muitos casos que esse não é diluído em água isso tem que ser feito pois esse totalmente diluído reage totalmente com as amostras obtendo assim, as variações de cor e tonalidade.

Foram coletadas 14 amostras de café através de doações, sendo amostras de café líquido (infusão do pó) sem açúcar (sacarose). As amostras eram diferenciadas através do lote ou marca orgânica, podendo analisar as especificidades quanto a composição, diferenciando sensitivamente as amostras de acordo com as variações.

4. Resultados

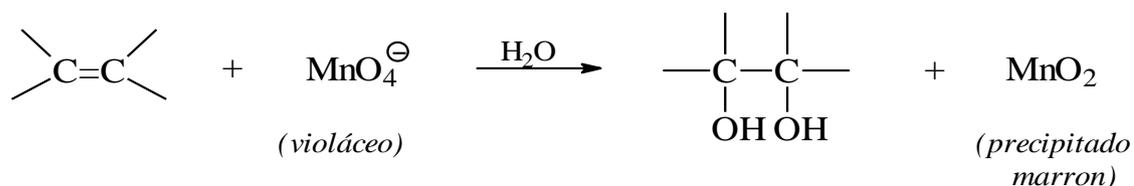
A figura 1 mostra a capacidade do método de diferenciar as amostras. Então as reações demonstradas com as amostras especificam os testes feitos com o reagente KMnO_4 observando que esse era adequado para realizar os demais testes devido a variação de cor e tonalidade, definindo assim, as amostras com as características.



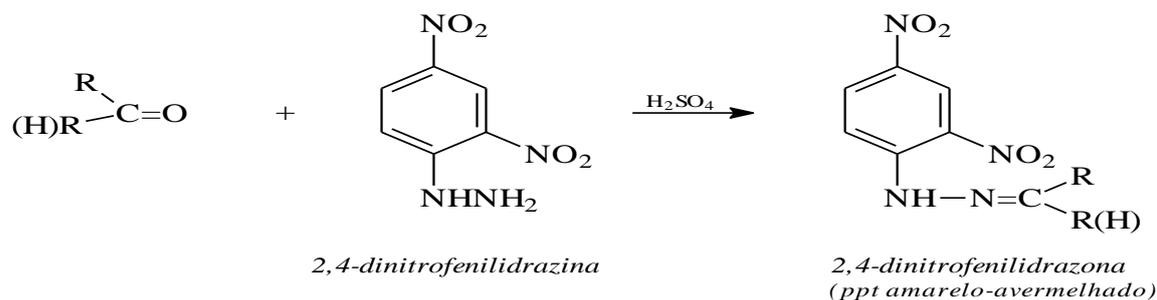
Figura 1 – Reação das amostras 1 – Aspirina, 2 – Açúcar, 3 – Trigo, 4 – Gelatina e C – Controle com o reagente KMnO_4 .

Assim as reações podem proporcionar variações específicas de acordo com a amostra que podem ser definidas pelas seguintes equações:

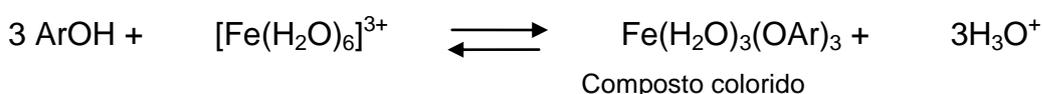
Reagente KMnO_4 :



Reagente 2,4 DNF:



Reagente FeCl₃:



Então as variações obtidas dependem do produto que define a coloração e assim o composto orgânico. Ao colocar os reagentes as amostras demonstravam variações de coloração e tonalidade específica, correspondente à amostra, definindo-a. Com isso, quanto se colocou o KMnO₄ nas amostras de aminoácidos (fig. 2) essas demonstraram variações no momento que era colocado o reagente e apresentava mudança conforme o tempo devido a oxidação do KMnO₄.

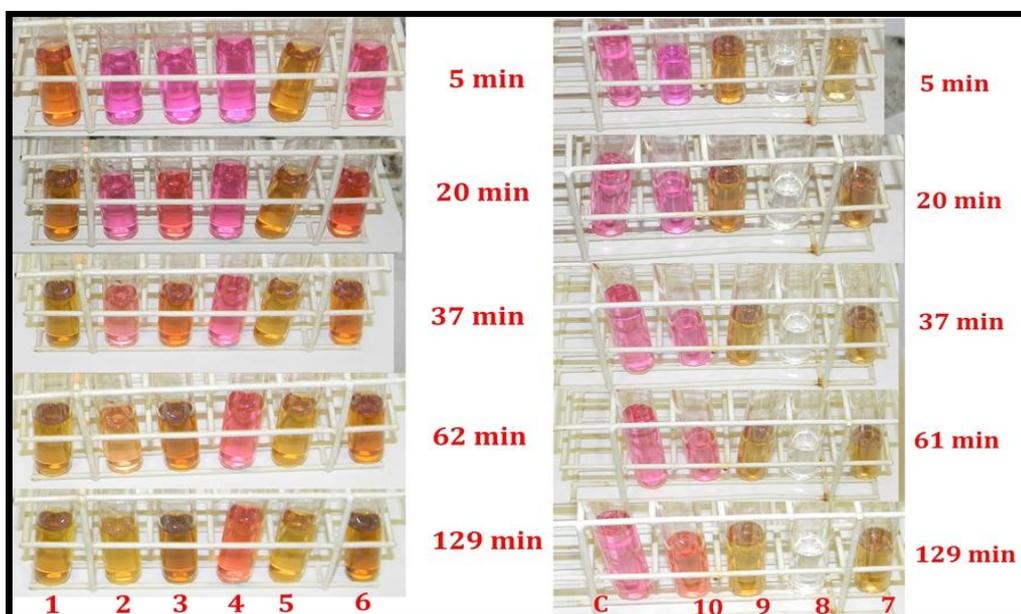


Figura 2 – Amostras de aminoácidos quanto se colocou o reagente Permanganato de potássio (KMnO₄), as variações de cor e tonalidade ocorreram conforme o tempo. (1) Cistina; (2) Arginina; (3) Prolina; (4) Fenilalanina; (5) Tirosina; (6) Glicina; (7) Histidina; (8) Cisteína; (9) Triptofano; (10) Alanina e (C) controle.

Já quando colocou-se o reagente 2,4 DNF, as amostras variaram mais de tonalidade (fig. 3) diferenciando assim, as amostras de aminoácidos baseados no controle. Para realizar o teste das amostras com o reagente, adicionou-se no mesmo ácido clorídrico, pois esse apresenta variação de coloração e tonalidade, ou seja, oxida, se for colocado em meio ácido, pois isso influencia na sua diluição evitando a formação de precipitado (CEOLIN, 2009).

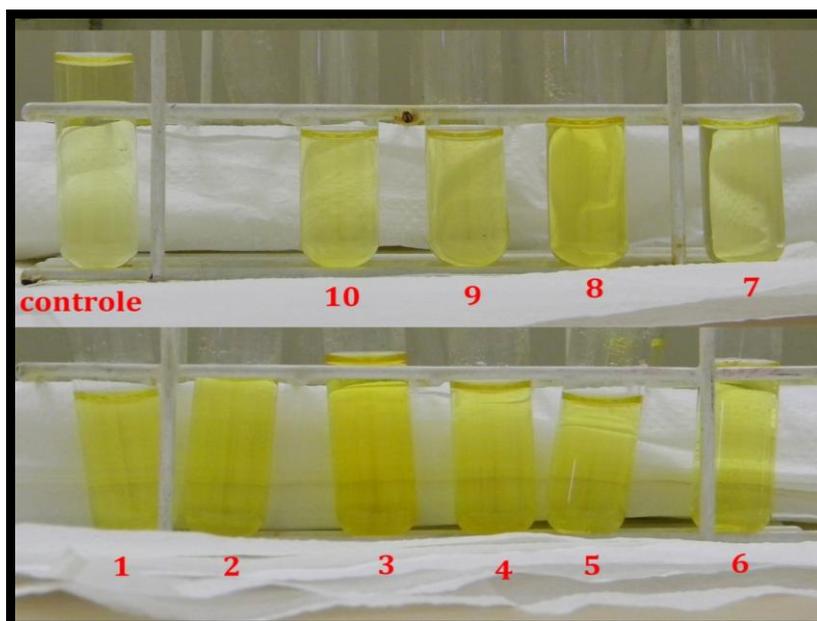


Figura 3 – Reação dos aminoácidos com o reagente 2,4 DNF.

Com o reagente FeCl_3 as amostras de aminoácido demonstraram uma variação de coloração e tonalidade (fig. 4) especificando assim, as amostras que possuem características com produtos que definem a cor da reação com as amostras. A diferença de coloração pode ser observada com o controle, sendo esse constituído apenas por uma solução do reagente com água destilada.

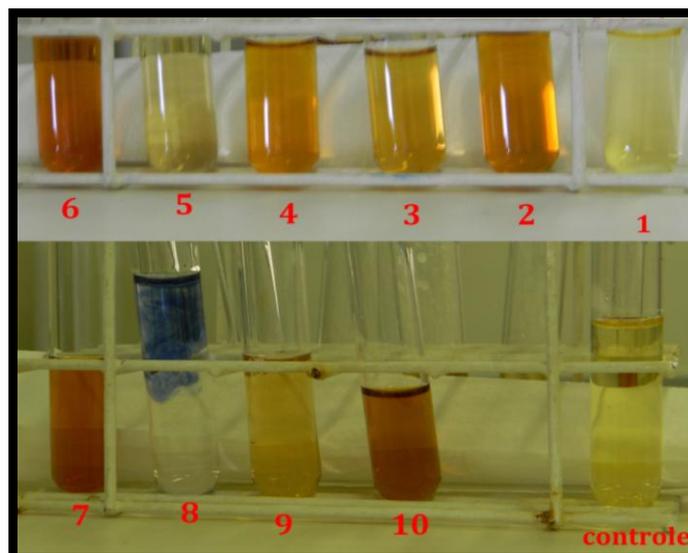


Figura 4 – Reação das amostras de aminoácidos com o Cloreto férrico.

Assim realizaram-se testes das amostras de café coletadas com os três reagentes e observaram-se as variações definindo e diferenciando as amostras orgânicas e de lote. Então, diluí-se o KMnO_4 em 400 mL de água:

$$C_1 \cdot V_1 = C_2 \cdot V_2$$

Onde:

$$C_1 = \text{concentração de } \text{KMnO}_4 \text{ da solução inicial} = 0,1 \text{ mol.L}^{-1}$$

$$V_1 = \text{volume de } \text{KMnO}_4 \text{ da solução inicial} = 100 \text{ mL} = 100 \cdot 10^{-3} \text{ L}$$

$$C_2 = \text{concentração da solução de } \text{KMnO}_4 = ?$$

$$V_2 = \text{volume final da solução de } \text{KMnO}_4 = 400 \text{ mL} = 400 \cdot 10^{-3} \text{ L}$$

Sendo C_2 :

$$0,1 (100 \cdot 10^{-3}) = C_2 \cdot 400 \cdot 10^{-3}$$

$$0,01 = 400 \cdot 10^{-3} C_2$$

$$C_2 = \frac{0,01}{400 \cdot 10^{-3}}$$

$$C_2 = 0,025 \text{ mol.L}^{-1}$$

Então a concentração da solução do reagente KMnO_4 que foi utilizado para aos testes das amostras de café passou a ser $0,025 \text{ mol.L}^{-1}$.

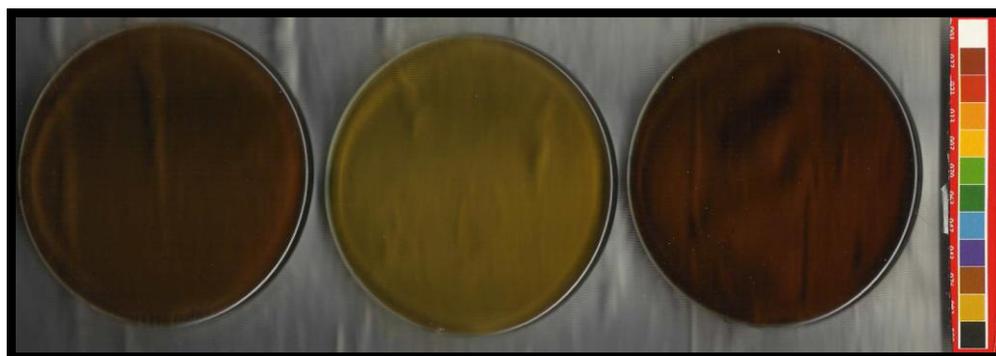


Figura 5 – Exemplo da aquisição da imagem de uma amostra de café.

As imagens das amostras foram tratadas através do modelo de Análise de Componentes Principais, podendo demonstrar variações, e assim pode-se observar dentro da elipse (grafico 1) todas as marcas comerciais adquiridas em supermercado. Cada símbolo e cor representa uma mesma marca comercial sendo que existe uma grande variação entre as marcas comerciais. Fora da elipse podemos observar as marcas orgânicas.

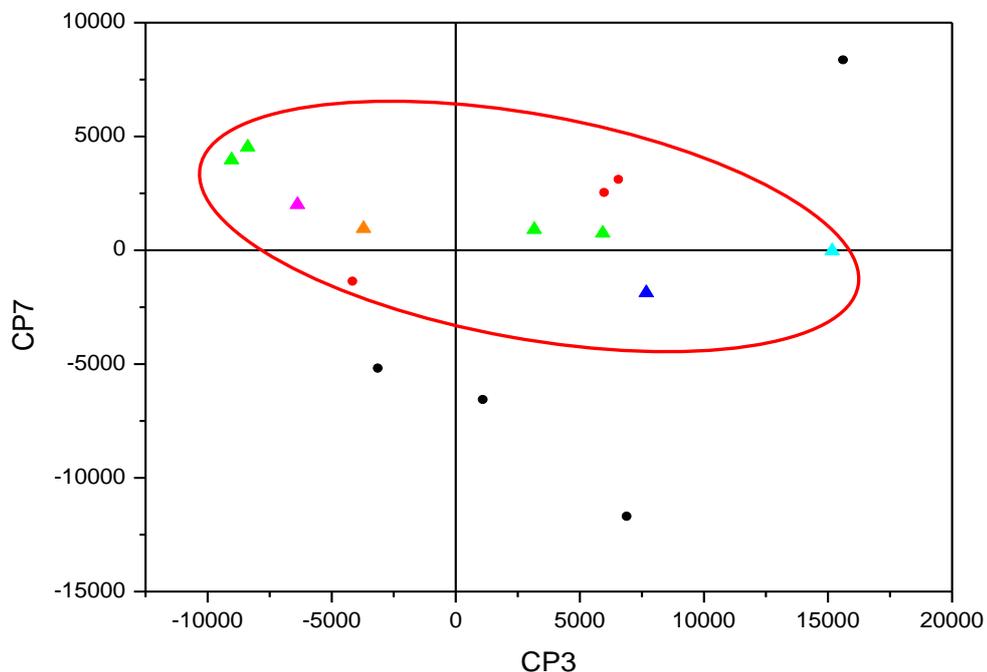


Gráfico 1 - Análise das amostras de café por PCA

5. Conclusão

As variações de cor ocorrem conforme as reações entre amostras e reagentes acontecem, ou seja, à medida que reações orgânicas (oxidação ou substituição) acontecem havendo a mudança de coloração e tonalidade (mais claro e mais escuro). Assim, observou-se que as variações definem as amostras, já que cada uma demonstrou coloração ou tonalidade específica identificando assim os compostos orgânicos. As variações podem não ser percebidas visualmente devido à limitação do olho humano, porém podem ser identificadas com um scanner, facilitando a identificação das amostras, principalmente as reações que mudaram apenas de tonalidade. Além disso, o scanner facilita a identificação de mudanças de coloração nas amostras, devido à detecção de impurezas, misturas de variedades, diferentes níveis de torrefação, nas amostras de café que devido a esses fatores possuem variações de lote.

O tratamento de imagens com o scanner permitiu uma sensibilidade na análise das amostras, pois principalmente as pequenas variações das reações puderam ser trabalhadas e detalhadas, proporcionando uma precisão analítica. Essa precisão é bastante favorável, já que identificou pequenas variações em amostras com os mesmos reagentes. As amostras de café apresentaram variações entre as orgânicas e as de lote demonstrando como a origem é significativa. No entanto, para a realização dos testes foi necessário selecionar os reagentes usados, pois esses são decisivos nas variações de coloração e tonalidade para identificar os compostos orgânicos.

6. Perspectivas de continuidade ou desdobramento do trabalho

Como continuidade do projeto, pretendemos continuar as análises das amostras de café para compreender melhor os motivos das variações e as diferenças entre os diversos tipos das amostras coletadas. Assim testar também outros reagentes e ainda analisar a possibilidade de trabalhar diferenciadamente os já usados, como por exemplo, diluir mais os reagentes, pretendendo aperfeiçoar e observar as mudanças com os mesmos que mais se adéquam para os testes com as amostras.

Para tanto, observar as mudanças das imagens no scanner e assim analisar o motivo das variações de coloração em relação aos compostos orgânicos que proporcionam essas variações. Além disso, comparar os resultados para buscar entender os motivos da variação, aproveitando a sensibilidade e a especificidade do scanner e das reações de distinguir os resultados.

7. Apoio e Agradecimentos

O projeto teve financiamento pelo CNPq. Aos alunos e servidores do Instituto Federal que nos forneceram as amostras de café para realizar as análises.

8. Referências Bibliográficas

CEOLIN, M., P. (2009) *Análise Orgânica Qualitativa II Classificação de Grupos Funcionais – Preparação de Derivados*. Disponível em: <<http://www.ebah.com.br/content/ABAAAjjsAB/apostila-relatorio-final-organica-iv>> Acesso em: 24 jul. 2012.

GODINHO, M. S. et al. Classificação de Refrigerantes através de Análise de Imagens e Análise de Componentes Principais (PCA). In: *Química Nova*, vol. 31, n. 6, p. 1485-1489, ago. 2008.

LEGIN, A. (2011) *Electronic Tongue team*. Disponível: <http://www.electronic tongue.com/> Acesso em: 21 jul. 2012.

LIMA, D. R. (s.d.) *Café e composição química*. Disponível em: <<http://www.abic.com.br>>. Acesso em: 15 ago. 2012.

s.a. [2011?] *Aminoácidos: Prolina, Alanina, Triptofano, Tirosina, Arginina, Histidina, Glicina*. Disponível em: <www.explicatorium.com/quimica> Acesso em: 24 jul. 2012.

s.a. [2011?] *Aminoácidos: Cisteína, Cistina e Fenilalanina*. Disponível em: <<http://pt.wikipedia.org/wiki>> Acesso em: 24 jul. 2012.

9. Bibliografia

s.a. (2010) *Titulação de oxi-redução de $KMnO_4$* . Disponível em: <<http://www.ebah.com.br/content/ABAAA93sAC/relatorio-quimica-analitica>>. Acesso em: 20 jul. 2012