



REATIVIDADE DOS ISO- α -ÁCIDOS FRENTE AO RADICAL DPPH \cdot

Andrade, M. A.¹; Almeida, N. E. C.¹, Cardoso, D. R.¹

¹Instituto de Química de São Carlos – Universidade de São Paulo, São Carlos, São Paulo, e-mail: drcardoso@iqsc.usp.br

Os iso- α -ácidos (IAAs), também conhecido como isohumulonas, são compostos derivados de lúpulo e estão presentes na cerveja, conferindo o amargor característico da bebida e a qualidade da espuma. Os IAAs compreendem dois pares de diastereoisômeros, *trans*-IAAs e *cis*-IAAs. Sabe-se que durante o processo de envelhecimento da cerveja, algumas espécies radicalóides são formadas, tais como os radicais fenoxila. Assim, o objetivo do presente trabalho consiste em investigar a reatividade do diastereoisômero *trans*- na forma molecular e aniônica frente ao radical DPPH \cdot . Os *trans*-IAAs foram isolados partindo-se de uma solução comercial contendo uma mistura de sais de potássio das isohumulonas, promovendo uma complexação seletiva empregando β -ciclodextrina. Para estudar a reatividade dos IAAs frente aos radicais fenoxila, utilizou-se o DPPH \cdot (2,2-difenil-1-picrihidrazil) como um modelo representativo da espécie radicalar. Realizam-se titulações espectrofotométricas, empregando condições de pseudo-primeira ordem para a reação, onde excessos nas concentrações dos *trans*-IAAs com relação à concentração do radical foram utilizados. Através do monitoramento da absorbância em 520 nm, referente ao radical DPPH \cdot , obteve-se a constante de velocidade observada, k_{obs} , para cada concentração de *trans*-IAA utilizada pelo gráfico de decaimento da absorbância *versus* tempo. Do gráfico de k_{obs} *versus* [*trans*-IAAs] determinou-se a constante de velocidade específica, k_2 , da reação estudada. Assim, para os *trans*-IAAs na forma molecular, k_2 foi igual a 1,97 L mol⁻¹ s⁻¹ e para os *trans*-IAAs na forma aniônica, k_2 foi igual a 0,15 L mol⁻¹ s⁻¹. Pela variação da temperatura no meio reacional, determinou-se a entalpia de ativação, ΔH^\ddagger , e a entropia de ativação, ΔS^\ddagger , para a reação entre dos *trans*-IAAs na forma aniônica e o radical estudado a partir do gráfico de Eyring, sendo seus valores iguais a 38,5 kJ mol⁻¹ e -132,8 J K⁻¹ mol⁻¹, respectivamente. Logo, a energia livre de ativação, ΔG^\ddagger , a 25 °C, obtida para a reação foi igual a 78,1 kJ mol⁻¹. Conclui-se que a forma molecular e aniônica dos *trans*-IAA apresentaram diferentes reatividades frente ao radical DPPH \cdot . Neste contexto, cálculos quânticos estão em andamento com a finalidade de obter informações adicionais sobre as estruturas químicas dos compostos estudados que possivelmente auxiliarão no entendimento da diferença de reatividade observada.

Agradecimentos: FAPESP e CNPq