



PARÂMETROS DE SOLUBILIDADE DE HANSEN APLICADOS NA EXTRAÇÃO LIPÍDICA DO CAFÉ ARÁBICA

Daliane C. Faria, Maria Eliana L. R. de Queiroz, Fábio Junior M. Novaes*

Departamento de Química, Universidade Federal de Viçosa, Viçosa, Minas Gerais, Brasil, 36570-900.

*e-mail: fabio.novaes@ufv.br

Os parâmetros de solubilidade de Hansen (PSH) são normalmente usados para estudos de solubilidade *in silico*. Esses são baseados no produto de três forças coordenadas (ligações de hidrogênio, δ_H , dispersão, δ_D , e forças dipolares, δ_P) calculadas para qualquer substância a fim de prever a miscibilidade de um composto em um solvente puro, em uma mistura de solventes ou em compostos não solventes, economizando tempo e custos no desenvolvimento de métodos baseados na composição química e das interações intermoleculares de seus constituintes. Esta abordagem foi incorporada na extração de fitoquímicos da fração lipídica de grãos de café como uma alternativa às abordagens de tentativa e erro, evitando desperdício de solvente e outros recursos. Inicialmente, uma amostra de óleo de café foi obtida por prensagem e determinada por cromatografia gasosa acoplada à espectrometria de massas (CG-EM), onde foi identificado ácidos graxos, cafeína, diterpenos livres e esterificados, triterpenos, di e triacilgliceróis. Aos componentes da amostra fez-se a quantificação por normalização de área. PSH foram calculados para cada componente do óleo e, por fim, a fração destes no óleo a fim de se conhecer o PSH da mistura final ($\delta_D = 15,71$, $\delta_P = 9,61$ e $\delta_H = 3,49$ sobre um gráfico 3D e o produto dos vetores $\delta_{Total} = 15,42$). Esses valores foram utilizados para selecionar solventes candidatos para a extração lipídica, considerando R_a , a distância entre os PSH do óleo de café com diferentes solventes. Dezoito solventes foram categorizados em ordem crescente de R_a , além de ponto de ebulição (PE), grau de toxicidade (GT), custo de aquisição e outros parâmetros. Dentre esses, terpenos, ésteres, éteres, hidrocarbonetos e álcoois. Terpenos e alguns ésteres foram eliminados devido aos altos PE ($>150^\circ\text{C}$), o que é oneroso para serem recuperados. Solventes voláteis como acetato de metila foram descartados por promover perdas durante a extração (PE = $44,0^\circ\text{C}$). Solventes polares como água, metanol, etanol e 1-butanol foram excluídos devido maior valor de R_a (12,0). Por fim, quatro solventes foram selecionados: ciclopentil metil éter (R_a : 2,09, PE: $105,3^\circ\text{C}$, R\$ 1.151,00/L e GT 4), acetato de etila (R_a : 3,73, PE: $73,9^\circ\text{C}$, R\$ 523,00/L e GT 5), *n*-hexano (R_a : 5,5, PE: $68,5^\circ\text{C}$, R\$ 323,00/L e GT 5) e dimetil carbonato (R_a : 6,22, PE: $90,5^\circ\text{C}$, R\$ 419,00/L e GT 5). Ciclopentil metil éter é o mais indicado segundo os PSH e também um dos mais seguros, enquanto que os demais são mais acessíveis. Apresentaremos no evento os rendimentos de extração a serem determinados por CG-EM para as confirmar previsões *in silico* e validar a eficácia desses solventes na determinação lipídica de grãos de café.

Agradecimentos: UFV, CNPq, CAPES, FAPEMIG.

- [1] Hansen, C.M. Hansen Solubility Parameters: A User's Handbook, 2nd ed.; CRC Press; Taylor & Francis: Boca Raton, FL, USA, 2007.
- [2] Hansen, C.M. The Three-Dimensional Solubility Parameter and Solvent Diffusion Coefficient: Their Importance in Surface Coating Formulation. Copenhagen: Danish Technical Press, Denmark, 1967; p. 1.
- [3] Novaes, F.J.M., de Faria D.C., Ferraz F.Z., de Aquino Neto F.R. Plants. 2023, 12(16), 3008
- [4] Cascant, M.M.; Breil, C.; Garrigues, S.; Guardia, M.; Fabiano-Tixier, A.S.; Chemat, F. Anal. Bioanal. Chem. 2017, 409, 3527.