

## ỨNG DỤNG PHƯƠNG PHÁP FT-RAMAN KẾT HỢP VỚI TÍNH TOÁN LƯỢNG TỬ ĐỂ NGHIÊN CỨU AXIT BÉO $\omega$ -3 TRONG THỰC PHẨM

Nguyễn Văn Đến, Dương Ái Phương, Lâm Quang Vinh

Trường Đại học Khoa học Tự nhiên – ĐHQG-HCM

(Bài nhận ngày 28 tháng 8 năm 2003, hoàn chỉnh sửa chữa ngày 24 tháng 10 năm 2003)

**TÓM TẮT:** Kỹ thuật phổ tán xạ Raman đang được ứng dụng rộng rãi. Tuy nhiên hạn chế của nó trong ngành phân tích sinh học và hoá học là vấn đề huỳnh quang. Với ưu điểm của FT-Raman đã khắc phục được hiện tượng trên.

Trong những nghiên cứu gần đây người ta phát hiện một số loại cá có chứa chất béo là  $\omega$ -3 có tác dụng tốt đối với các trường hợp cao huyết áp và các rối loạn về miễn dịch. Vì vậy việc ứng dụng phương pháp quang phổ FT-Raman kết hợp với tính toán lượng tử để phân tích hợp chất  $\omega$ -3 trong thực phẩm và dược phẩm là một vấn đề hết sức thực tiễn.

Từ kết quả tính toán lượng tử *ab initio*, dao động hoá trị nối đôi  $C=C$  ( $\nu_{C=C}$ ), dao động biến dạng  $C-H$ , và dao động biến dạng  $CH_2$  của chất chuẩn Lionelic axit điển phổ của các dao động này có thể sử dụng làm đỉnh đặc trưng cho việc xác định axit béo  $\omega$ -3. Kết hợp với phương pháp thực nghiệm FT-Raman cho ta quy trình phân tích định tính hợp chất  $\omega$ -3 trong thực phẩm.

### Axit béo

Axit béo là một chuỗi hydrocacbon dài với nhóm carboxyl. Trong axit béo có hai loại no và không no (có chứa nối đôi). Axit béo  $\omega$ -3 là loại axit không no có chứa nối đôi tính từ nhóm methyl ở cuối phân tử. Các chất béo trong tự nhiên thường có các axit sau:

Tên gọi	Số Cacbon	Số liên kết đôi	Vị trí liên kết đôi
Palmitate	16	0	
Stearate	18	0	
Oleate	18	1	9
Linoleate	18	2	9,12
Linolenate( $\omega$ -3)	18	3	9,12,15

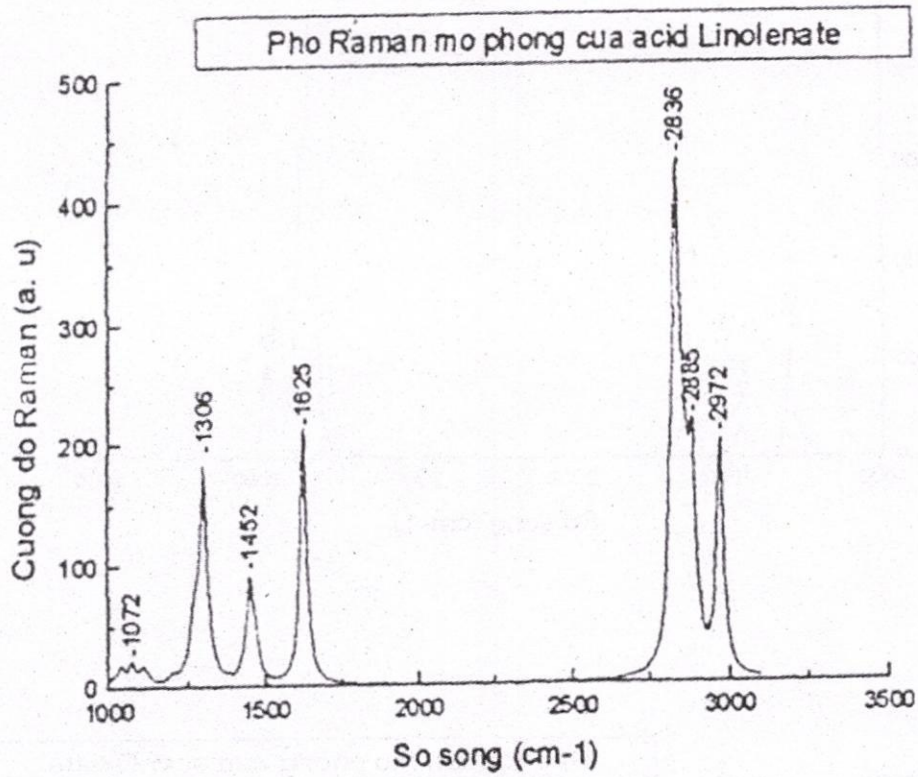
**Bảng 1 :** Các axit béo thường gặp

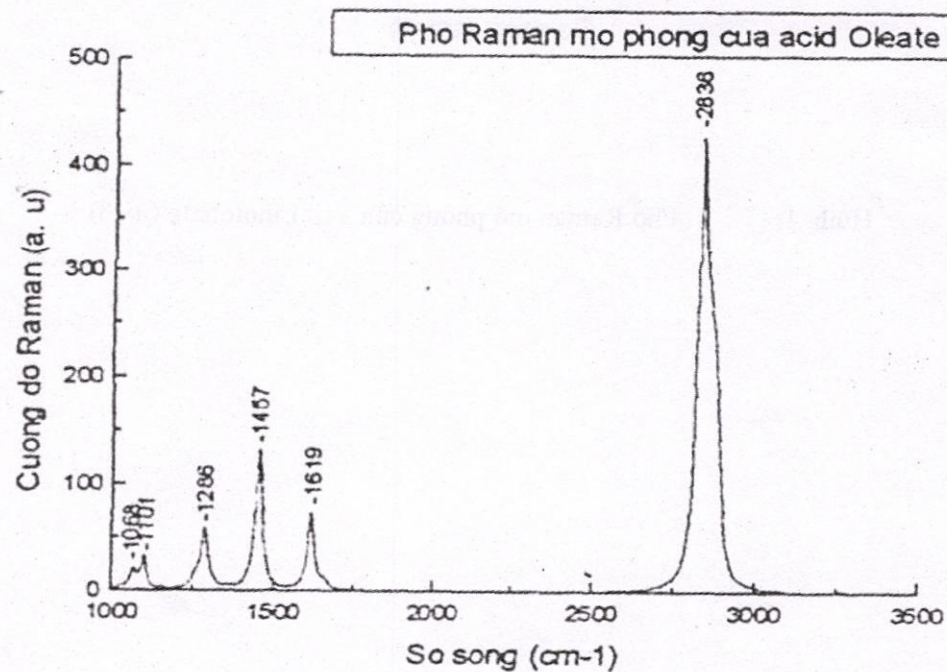
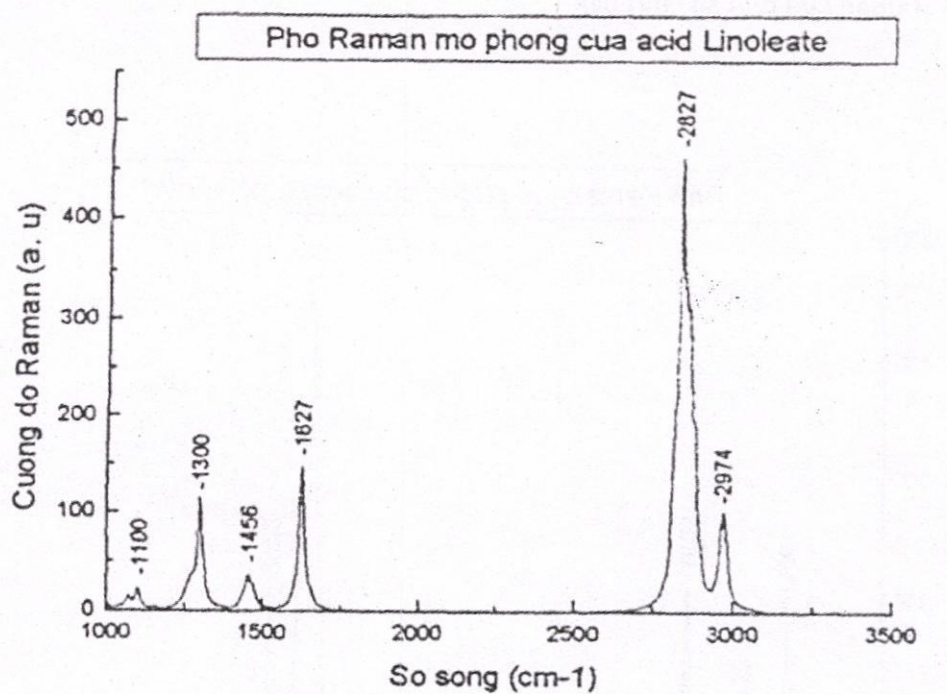
### Tính toán

Theo quan điểm của dao động nhóm, những nhóm giống nhau, trong các phân tử khác nhau thì sẽ cho cùng một tần số dao động, vì vậy phương pháp quang phổ dao động FT-Raman sẽ khó xác định các axit béo trên. Do đó đầu tiên chúng tôi áp dụng tính toán lượng tử và mô phỏng kết quả tính toán để xác định các dao động đặc trưng cho axit béo  $\omega$ -3. Tính toán lượng tử *ab initio* ở đây được thực hiện trên bộ phần mềm Gaussian 98 ở mức lý thuyết HF và hệ hàm cơ sở 6-31G\*.



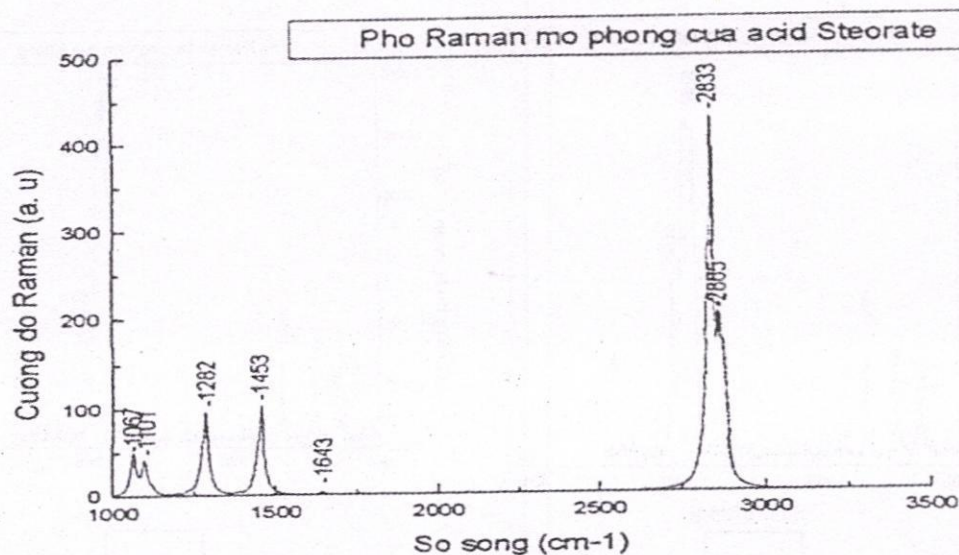
## Mô phỏng phổ Raman của một số chất béo

Hình 1: Phổ Raman mô phỏng của axit Linolenate ( $\omega$ -3)



Hình 2 : Phổ Raman mô phỏng của axit Linoleate (trên) và axit Oleate (dưới)





Hình 3: Phổ Raman mô phỏng của axit Stearate

**Nhận xét:**

Chúng tôi chú ý đến các vùng phổ sau:

- Vùng có số sóng từ  $1000\text{ cm}^{-1}$  đến  $1300\text{ cm}^{-1}$
- Vùng từ  $1400\text{ cm}^{-1}$  đến  $1500\text{ cm}^{-1}$
- Vùng dao động hoá trị của nối đôi C=C khoảng  $1630\text{ cm}^{-1}$
- Vùng từ  $2800\text{ cm}^{-1}$  đến  $3000\text{ cm}^{-1}$

Trong mẫu chuẩn  $\omega$ -3, dao động C=C ( $\nu_{C=C}$ ) ở mũi phổ  $1625\text{ cm}^{-1}$  có cường độ Raman rất mạnh chứng tỏ axit ở mức chưa no cao, trong acid có nhiều nối đôi (3 nối đôi). Cường độ dao động biến dạng  $\delta(\text{CH}_2)$  rất nhỏ, cường độ dao động  $\delta(\text{CH})$  cao hơn dao động biến dạng  $\delta(\text{CH}_2)$  nhiều  $\Rightarrow$  số nhóm  $\text{CH}_2$  giảm, số nhóm CH tăng lên do có nhiều nối đôi.

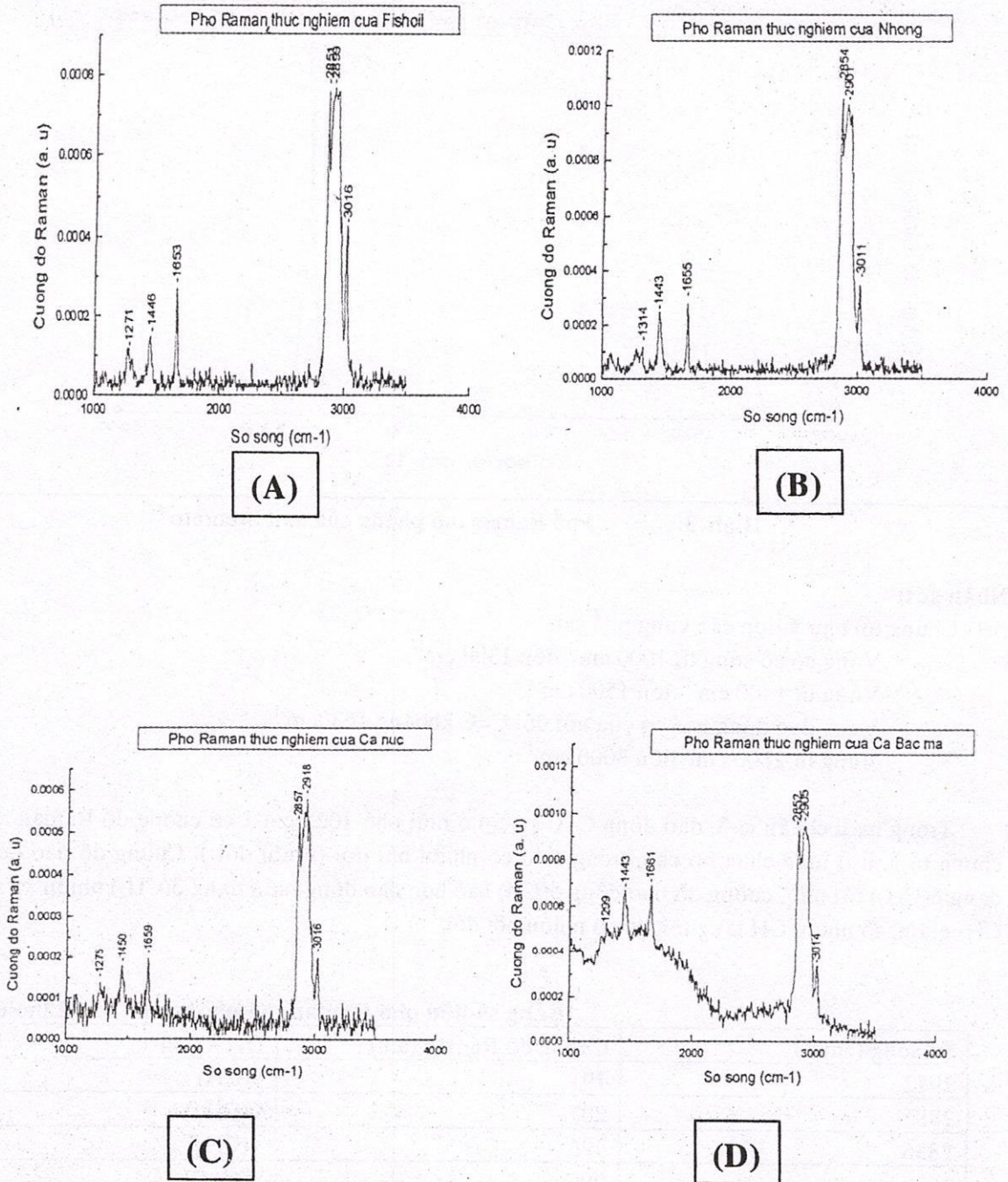
**Bảng số liệu phổ Raman mô phỏng của axit Linolenate**

Số sóng (cm-1)	Cường độ Raman (a.u)	Dao động
2972	191	$\nu(\text{CH})$
2885	207	$\nu(\text{CH}_3)$
2836	426	$\nu(\text{CH}_2)$
1625	205	$\nu(\text{C}=\text{C})_{\text{cis}}$
1452	84	$\delta(\text{CH}_2)$
1306	174	$\delta(\text{CH})$
1072	19	$\delta(\text{CH})$

**Thực nghiệm:**

Chúng tôi đã khảo sát một số loại mẫu cá như cá nục, cá bạc má, cá thu, nhộng và dầu cá. Tất cả đều được xử lý trước khi chạy phổ FT-Raman.





Hình 4: Phổ Raman thực nghiệm của Fishoil (A); Nhung (B); Cá nục (C); cá Bạc má(D)

**Nhận xét:**

Trong mẫu Fishoil, cường độ Raman của mẫu ở mũi 1635 cm<sup>-1</sup> có cường độ mạnh nhất. Đây là dao động hoá trị  $\nu(\text{C}=\text{C})$ . Ngoài ra còn có dao động biến dạng  $\delta(\text{CH}_2)$  ở tần số 1446 cm<sup>-1</sup>, dao động biến dạng  $\delta(\text{CH})$  ở mũi 1271 cm<sup>-1</sup>, dao động hoá trị C-H ở mũi phổ 2972 cm<sup>-1</sup>.

Trong mẫu Nhung, mũi phổ 1655 cm<sup>-1</sup> có Peak phổ cao nhất, dao động hoá trị  $\nu(\text{C}=\text{C})$  ở tần số này có cường độ lớn nhất. Ngoài ra, trong phổ còn có dao động biến dạng  $\delta(\text{CH}_2)$  ở tần số 1443 cm<sup>-1</sup>, dao động biến dạng  $\delta(\text{CH})$  ở tần số 1314 cm<sup>-1</sup> và dao động biến dạng C-H tại mũi phổ 2970 cm<sup>-1</sup>.

Trong mẫu cá Nục, mũi phổ 1659 cm<sup>-1</sup> là dao động hoá trị  $\nu(\text{C}=\text{C})$  có cường độ cao. Ngoài ra còn có dao động biến dạng  $\delta(\text{CH}_2)$  ở tần số 1450 cm<sup>-1</sup> và dao động biến dạng  $\delta(\text{CH})$  ở tần số 1275 cm<sup>-1</sup>.



Trong mẫu cá Bạc má, cường độ của dao động hoá trị  $\nu(\text{C}=\text{C})$  ở tần số 1666  $\text{cm}^{-1}$  cao, cao hơn cường độ của dao động biến dạng  $\delta(\text{CH}_2)$  ở tần số 1443  $\text{cm}^{-1}$ . Trong mẫu còn có dao động biến dạng  $\delta(\text{CH})$  ở tần số 1299  $\text{cm}^{-1}$ .

Từ đó chúng tôi rút ra kết luận:

Từ mẫu chuẩn  $\omega$ -3, so sánh với phổ thực nghiệm, cho phép chúng tôi kết luận định tính là trong mẫu Fishoil, Nhung, cá Nục, cá Bạc má có chứa  $\omega$ -3. Do có sự pha tạp trong mẫu thêm vào đó chỉ có khoảng 70%  $\omega$ -3 trong Fishoil nên giữa lý thuyết và thực nghiệm có sự sai lệch nhau nhưng sự sai lệch này không đáng kể nên có thể chấp nhận được.

### Kết luận

Nghiên cứu này đã phần nào đã khẳng định việc ứng dụng các phần mềm tin học để tính toán, đồng thời kết hợp với thực nghiệm để dự đoán kết quả. Đây là xu hướng phát triển của nền khoa học cơ bản hiện nay.

Khẳng định ưu thế của quang phổ dao động FT-Raman trong phân tích thực phẩm sinh học (phân tích hoá sinh).

Kết quả nhận biết  $\omega$ -3 trong các hợp chất béo chỉ là định tính. Mở ra một hướng nghiên cứu mới là phân tích định hướng  $\omega$ -3 trong thực phẩm và dược phẩm.

## APPLICATION OF FT-RAMAN SPECTROSCOPY COMBINED WITH QUANTUM CALCULATION TO INVESTIGATE $\omega$ -3 FAT ACID IN FOOD

Nguyen Van Den, Duong Ai Phuong, Lam Quang Vinh  
University of Natural Sciences – VNU-HCM

*Abstracts: These studies make it clear that Raman spectroscopy can be employed as a powerful tool for investigating of materials. However, it is difficult to measure and analyse Biological, Chemical material because of fluorescence effects. The advantages of FT-Raman is reduction or elimination of fluorescence.*

*Recently, these studies have discovered in some of fish fatty in which have linolenic ( $\omega$ -3) fatty acid. It essential for human body. The effect of it on atheromatous and atherosclerotic lesions. Therefore, the purpose of this study is application of FT-Raman spectroscopy combine quantum calculation to investigating  $\omega$ -3 fatty acid in the food.*

*It was found that these results of the calculation can explain peak at 1658  $\text{cm}^{-1}$  of  $\nu(\text{C}=\text{C})$  stretching as a characteristic peak for analytic lionlenic ( $\omega$ -3) fatty acid in the food.*

### TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1] *Introduction Raman Spectroscopy* - John R.Ferraro Kazuo Nakamoto, 1995
- [2] *Giáo trình quang phổ phân tử* - Dương Ai Phương
- [3] *Introduction to Infrared and Raman Spectroscopy* - NB Colthup, Iotl Daly, S.E. Wiberly, 1990
- [4] *Thực tập sinh hoá* - Nguyễn Thượng Lệnh, Lâm Kim Châu
- [5] *Lipid và dầu thực vật trong dinh dưỡng hợp lý* - Bác sĩ Nguyễn Thị Kim Phụng
- [6] *Ứng dụng một số phương pháp phổ nghiên cứu cấu trúc phân tử* - Nguyễn Hữu Định, Trần Thị Đà - 1999
- [7] *Analytical Raman Spectroscopy* - G.Grasselli and J.Bullein - 1991