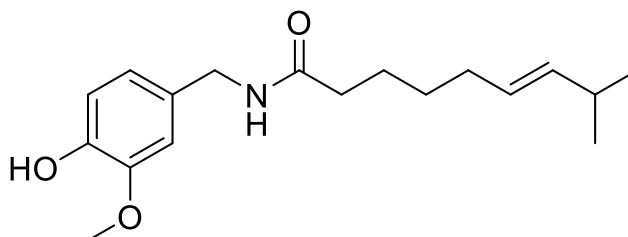


SOLUCIONS DE LA MOLÈCULA Nº 1

CAPSAÏCINA



$C_{18}H_{27}NO_3$ (CAS nº 404-86-4)

1. Es tracta d'un producte natural, concretament d'un alcaloide lipòfil amb propietats analgèsiques que s'utilitza tòpicament, ja que és fàcilment absorbit per la pell.

Els alcaloides, com ho és la capsaïcina, són compostos orgànics nitrogenats d'origen natural, sent en la majoria dels casos, d'origen vegetal. La capsaïcina s'aplica en la pell (ús tòpic) per alleujar el dolor. La seva absorció en la pell és ràpida, degut al seu caràcter hidrofòbic. Actua como agonista del receptor TRPV (Receptor de potencial transitori vaniloide, un canal catiònic) i la seva aplicació repetida té efectes analgèsics a través de la dessensibilització d'aquest receptor. La capsaïcina és el principi actiu d'alguns medicaments analgèsics com l'Alacpasin, Picasum, Capsicin, Capsidol, Hanasaterm, Qutenza o el Sensedol.

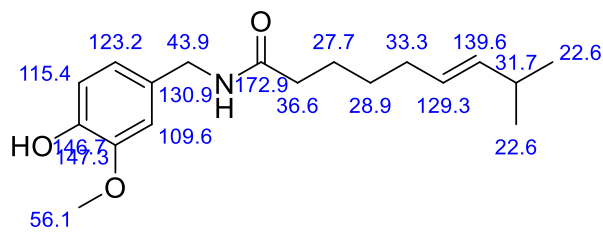
2. Està present en certa varietat de plantes, que generen aquest compost a partir de la fenilalanina com a defensa natural.

Tots els alcaloides d'una planta tenen el mateix origen biosintètic. En aquest cas, tant la capsaïcina com els altres components de la mateixa família dels capsaïcinoïdes es generen a partir de l'aminoàcid fenilalanina en certes varietats de pebroteres. La quantitat de capsaïcina present en la planta depèn fonamentalment de factors ambientals, incrementant-se per exemple per la secada. Es troba en quantitats més importants en la placenta del fruit, i en menys proporció en llavors i polpa.

La capsaïcina és un metabòlit secundari, que es produeix com a defensa contra els herbívors i protector contra els fongs.

3. L'espectre de ressonància magnètica nuclear de ^{13}C del compost presenta els següents senyals:

- 172.9 ppm
- 147.3 ppm
- 146.7 ppm
- 139.6 ppm
- 130.9 ppm
- 129.3 ppm
- 123.2 ppm
- 115.4 ppm
- 109.6 ppm
- 56.1 ppm
- 43.9 ppm
- 36.6 ppm
- 33.3 ppm
- 31.7 ppm
- 28.9 ppm
- 27.7 ppm
- 22.6 ppm (2C)

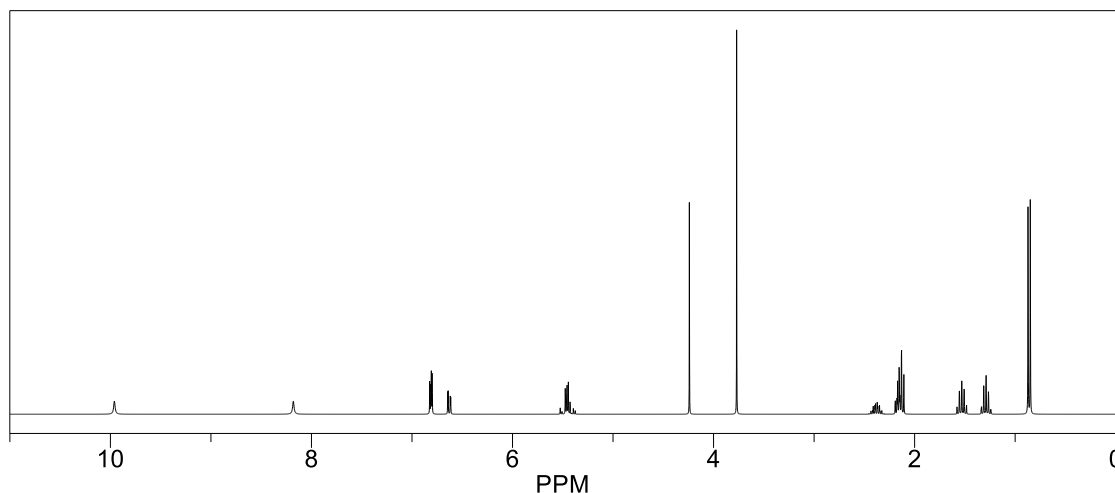


Assignació dels senyals:

L'estudi de l'espectre de RMN de ^{13}C ens permet identificar:

- Un carboni carbonílic d'amida (172.9 ppm).
- 8 carbonis amb hibridació sp^2 , aromàtics o de doble enllaç (147.3, 146.7, 139.6, 130.9, 129.3, 123.2, 115.4, 109.6 ppm).
- 2 carbonis units a heteroàtom (56.1, 43.9 ppm)
- 7 carbonis de caràcter alifàtic (36.6, 33.3, 31.7, 28.9, 27.7, 22.6 ppm (2C)), dos d'ells, els més apantallats, químicament equivalents, ja que corresponen al grup isopropil terminal.

L'espectre de RMN de ^1H del compost és el següent:



Assignació dels senyals:

La informació que es pot extreure de l'espectre de RMN ^1H és:

- Singlets a 9.96 i 8.18 ppm: corresponen a protons directament units a heteroàtoms (-OH i -NH-). La posició d'aquests senyals pot variar en funció de la temperatura i la formació d'enllaços d'hidrogen. Aquests tipus de protons acostumen a donar senyals en forma de singlets amplis.
- Doblets a 6.81 i 6.63 ppm: dos protons aromàtics acoblats entre sí situats en posició relativa orto. S'intueix un altre protó aromàtic en aquesta zona (singlet a 6.81 ppm)
- Senyals entre 5 i 6 ppm, corresponents a protons de doble enllaç.
- Singlets a 4.24 i 3.77 ppm: dos tipus de protons no acoblats amb altres, en un carboni unit directament a un heteroàtom (OCH_3 i $-\text{CH}_2-\text{NHCO}$).
- Senyals de protons alifàtics (2.38, 2.16, 2.13, 1.53, 1.29, 0.86 ppm). El senyal a 0.86 ppm és un doblet degut a l'acoblament dels dos metils terminals amb el protó del grup isopropil, que correspon al multiplet a 2.38 ppm.

4. Des de l'any 1995, s'han registrat molts productes insecticides i rodenticides basats en aquesta substància a l'Agència de Protecció del Medi Ambient dels Estats Units.

La capsaïcina es troba a la llista federal dels EEUU de substàncies classificades com a actives i regulades en pesticides (Pesticide Chemical Search Database). Es pot trobar informació detallada a

<https://comptox.epa.gov/dashboard/chemical/details/DTXSID9020241?list=EPAPCS>.

5. Determinades varietats de pebrot picant deuen el seu gust picant a uns 14 compostos d'estructura relacionada amb la nostra molècula, tots ells amb un grup funcional tipus amida; sent la majoritària la molècula nº 1 del nostre concurs.

Els pebrots més picants i per tant amb més contingut de capsaïcina són els del grup anomenat *habanero* seguits dels *xili* o el bitxo. Alguns tipus de pebrots com els anomenats *Del Piquillo* i *Del Padrón* s'estan seleccionant genèticament per a eliminar els exemplars que són coents.

En ser la capsaïcina una substància lipòfila no és útil beure aigua per eliminar el gust picant, sinó que cal prendre, per exemple, llet no desnatada que és rica en greixos.