

Uso de corantes solvatocrômicos na investigação de misturas de clorofórmio com solventes receptores de ligação de hidrogênio

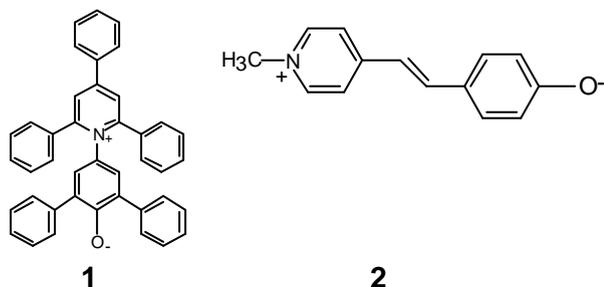
Fabiola Maria Testoni¹ (IC), Vanderlei Gageiro Machado¹ (PQ)* gageiro@furb.br

¹ Departamento de Química, Universidade Regional de Blumenau, FURB, Blumenau, SC, 89012-900.

Palavras Chave: solvatação preferencial, solvatocromismo, sinergia.

Introdução

O estudo das interações solvente-solvente e solvente-soluto em uma mistura pode ser feito através de sondas solvatocrômicas¹. Estas sondas apresentam bandas na região visível do espectro e sofrem deslocamento à medida que a polaridade do meio se altera. Em misturas de solventes, a esfera de solvatação do corante indicador pode ser diferente daquela do solvente como um todo, caracterizando o termo *solvatação preferencial* (SP). Neste trabalho foram utilizados o 2,6-difenil-4-(2,4,6-trifenilpiridínio)fenolato (corante de Reichardt)¹ (**1**) e a merocianina de Brooker (**2**)² como sondas para a investigação de misturas binárias de clorofórmio com solventes receptores de ligação de hidrogênio (DMSO, DMF, DMA, acetona e acetonitrila), com o objetivo de estudar a capacidade do clorofórmio para atuar como um solvente fracamente doador de ligações de hidrogênio (LH) e desta forma lançar mais luz sobre a natureza desta importante classe de interações intermoleculares.

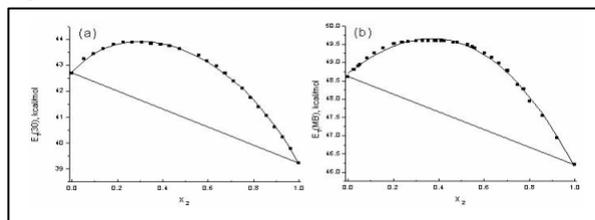


Resultados e Discussão

Após registrados os espectros, seus máximos nos comprimentos de onda ($\lambda_{\text{máx}}$) foram convertidos em valores de energia de transição molar, E_T , através da expressão $E_T = 28590/\lambda_{\text{máx}}$. Então, construíram-se gráficos de E_T em função de X_2 , a fração em mol do clorofórmio nas misturas, e ajustaram-se os dados a um modelo de troca de solventes,² obtendo-se assim parâmetros de solvatação preferencial. Foi observada para todas as curvas uma forte sinergia (Figura), ou seja, as misturas se mostraram mais polares que os componentes puros, significando que os corantes são solvatados nas misturas por complexos S_{12} 1:1 formados pelo clorofórmio e o outro solvente por meio de LH. Além disso, observou-se que a parte mais polar destes complexos é a responsável pela 29ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

solvatação das misturas. Os resultados demonstraram que, com o corante de Reichardt, a SP por parte do clorofórmio aumenta segundo a ordem: DMSO < DMA < DMF < acetona < acetonitrila, que corresponde à ordem decrescente da capacidade receptora de LH. Isto sugere que a interação menor com o cossolvente torna as moléculas do clorofórmio mais livres para interagir com o corante. O efeito observado em acetonitrila é muito mais intenso que para os outros solventes, pois ela apresenta uma acidez apreciável e compete com o clorofórmio, dificultando um pouco a formação dos complexos S_{12} . A mesma tendência pôde ser observada com o corante **2**, embora em menor proporção. Os dados apontam para o fato de que, com este corante, a capacidade do clorofórmio para solvatá-lo preferencialmente diminui em comparação com o outro componente mais polar da mistura. Isto deve estar ligado ao fato de o corante **2** ser menos lipofílico que o corante **1**, o que o torna mais apto para ser solvatado pelo componente mais polar da mistura.

Figura. Corantes **1** (a) e **2** (b) em misturas DMA- CHCl_3 .



Conclusões

Os corantes estudados neste trabalho são bastante hábeis para relatar interações solvente-solvente que podem ocorrer entre um solvente doador de LH muito fraco, como é o caso do clorofórmio, e outro solvente receptor de LH. Foi observado um comportamento fortemente sinérgico para todas as misturas, o qual pôde ser descrito matematicamente pelo modelo de SP empregado.

Agradecimentos

PIBIC/FURB e CNPq.

¹ Reichardt, C.; *Chem. Rev.* **1994**, 94, 2319.

² Bevilaqua, T.; da Silva, D.C.; Machado, V.G. *Spectrochim. Acta Part A* **2004**, 60, 951.