

## Efeito dos solventes DMSO e acetonitrila sobre a reação de hidrólise do 8-*N,N*-dimetilamino-1-naftildietilfosfato.

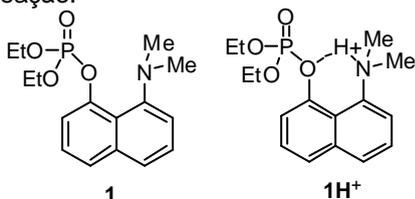
Daniel Walker Tondo (PG)\*, Faruk Nome (PQ) [hairwalker@pop.com.br](mailto:hairwalker@pop.com.br)

Departamento de Química, Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis/SC.

Palavras Chave: hidrólise, triéster de fosfato, efeito do solvente

### Introdução

Diferente de mono e diésteres, os triésteres de fosfato não têm sido identificados em sistemas biológicos, mas constituem estruturas básicas na composição de inseticidas, pesticidas e outros compostos tóxicos, como armas químicas. O estudo da hidrólise de tais compostos é fundamental para o entendimento de sua degradação no ambiente. O presente trabalho visa o estudo da reação de hidrólise do 8-*N,N*-dimetilamino-1-naftildietilfosfato **1**, bem como o efeito dos solventes DMSO e acetonitrila sobre a reação.



### Resultados e Discussão

As reações de hidrólise foram realizadas em solução aquosa a 60,0 °C e acompanhadas em 330 nm por espectrofotometria UV/VIS. A figura 1 mostra o perfil cinético de hidrólise de **1** na ausência de solventes. Nota-se um patamar para as constantes de velocidade quando pH = 4. Nesta região de pH, a espécie **1H<sup>+</sup>** é a predominante em solução já que a constante de dissociação do grupo dimetilamônio possui pKa = 4,63<sup>1</sup>. Assim, **1H<sup>+</sup>** corresponde à espécie reativa na reação de hidrólise.

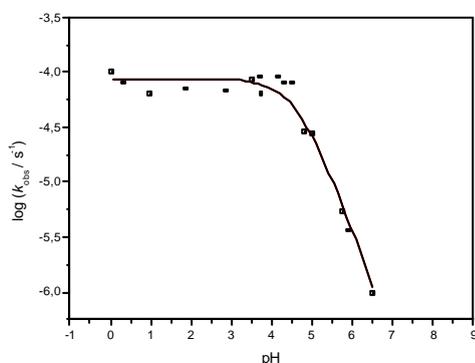


Figura 1.  $\log(k_{\text{obs}})$  vs pH para a reação de hidrólise de **1** a 60°C.  $\mu = 1$ .

A influência dos solventes DMSO e acetonitrila sobre a hidrólise de **1H<sup>+</sup>** foi investigada através de estudo cinético do efeito das misturas H<sub>2</sub>O/DMSO e H<sub>2</sub>O/acetonitrila, variando-se a proporção dos solventes nas misturas. As soluções foram acidificadas com HCl até concentração 0,1 M, para garantir a presença da espécie reativa **1H<sup>+</sup>**. Observou-se uma maior velocidade para a hidrólise em DMSO em relação ao acetonitrila em todas as proporções da mistura H<sub>2</sub>O/solvente. No intervalo de [H<sub>2</sub>O] entre 55,5 e 5,5 M apenas um aumento de velocidade para a reação em DMSO foi observado. Em concentrações de solvente orgânico = 91%, observamos um aumento acentuado na constante de velocidade para ambos casos (figura 2), fato que indica uma diminuição na interação entre as moléculas de água na solução.

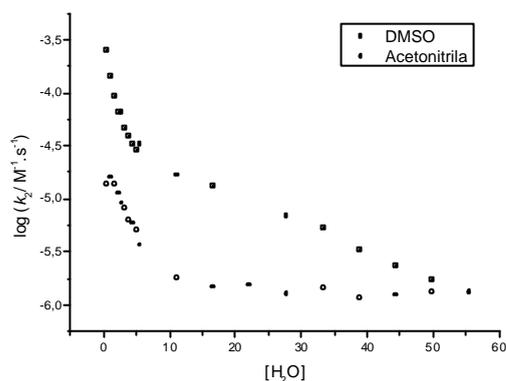


Figura 2.  $\log(k_2)$  vs [H<sub>2</sub>O] para a reação de hidrólise de **1H<sup>+</sup>** em DMSO e acetonitrila. T = 60°C.

### Conclusões

O estudo comprova a eficiência de solventes dipolares apróticos na hidrólise de **1H<sup>+</sup>**, com destaque para o DMSO em relação à acetonitrila, pela sua melhor capacidade de interação com as moléculas de água.

### Agradecimentos

Ao PRONEX, CNPq, CAPES.

<sup>1</sup> Assad, N.; Kirby, A.J. *J. Chem. Soc. Perkin Trans. 2* **2002**, 1708.