

# Interações solvente-solvente em misturas de solventes contendo clorofórmio e um outro solvente aceitador de ligações de hidrogênio

Fabíola Maria Testoni (IC), Eduardo Alberton Ribeiro (PG), Vanderlei Gageiro Machado (PQ)\*  
gageiro@furb.br

Departamento de Química, Universidade Regional de Blumenau, FURB, CP 1507, Blumenau, SC, 89010-971

Palavras Chave: solvatação preferencial, solvatocromismo, sinergia.

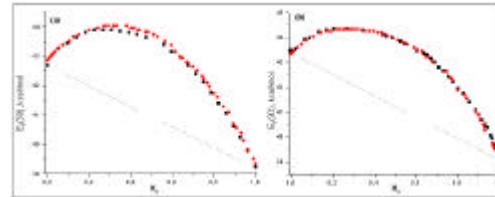
## Introdução

Muitos estudos são comumente realizados com o intuito de se alcançar uma melhor compreensão da natureza das interações solvente-solvente e soluto-solvente. Dentre eles, merecem destaque os que fazem uso das sondas solvatocrônicas,<sup>1,2</sup> que são compostos que apresentam bandas na região visível do espectro que sofrem deslocamento à medida que a polaridade do meio é alterada. Em misturas de solventes, a esfera de solvatação do soluto pode ser diferente daquela do solvente como um todo, caracterizando o termo *solvatação preferencial* (SP). Dentre os diferentes estudos que tratam da questão da SP, há bastante interesse na investigação das ligações de hidrogênio (LH) como uma força intermolecular importante para as interações solvente-solvente. Neste aspecto, é de especial interesse as interações intermoleculares que ocorrem em misturas de solventes apresentando um solvente fracamente doador de LH, como o clorofórmio ( $\text{CHCl}_3$ ) e outro aceitador de LH.<sup>3</sup> Neste trabalho, foi utilizado o 2,6-difenil-4-(2,4,6-trifenilpiridinio)fenolato (corante de Reichardt) (**1**) como sonda solvatocrônica na investigação de misturas binárias de  $\text{CHCl}_3$  e clorofórmio deuterado com solventes aceitadores de LH (DMSO, DMF, DMA, acetona e acetonitrila), com o objetivo de estudar a capacidade do clorofórmio para atuar como um solvente fracamente doador de LH e o que acontece quando  $\text{CDCl}_3$  é utilizado nas misturas. Finalmente foram coletados dados referentes a misturas envolvendo  $\text{CHBr}_3$  com solventes aceitadores de LH usando-se **1**, e comparados às misturas de  $\text{CHCl}_3$  com os mesmos.

## 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  $E_T = 28590/\lambda_{\text{máx}}^2$ . Então, construíram-se gráficos de  $E_T$  em função de  $X_2$ , a fração em mol do solvente doador de LH nas misturas, e ajustaram-se os dados a um modelo de troca de solventes,<sup>2</sup> obtendo-se assim parâmetros de SP. Foi observada para todas as curvas uma forte sinergia, ou seja, as misturas se mostraram mais polares que os componentes puros, significando que o corante é solvatado nas misturas por complexos  $S_{12}$  1:1

formados pelos solventes por meio de LH. Infelizmente, o corante **1** não apresentou habilidade para discriminar de forma apreciável as diferenças de energia entre LH e ligação de deutério (LD) em clorofórmio e em clorofórmio deuterado (Figura). Muito provavelmente estas diferenças de energia são muito pequenas devido ao fato de o clorofórmio ser um fraco doador de LH. Ainda assim, os dados sugerem para alguns solventes fortemente aceitadores de LH, como o DMA, que as ligações de deutério são mais fortes que as LH.



**Figura.** Valores de  $E_T(30)$  em misturas de (a) DMA e (b) DMF; com  $\text{CHCl}_3$  (○) e  $\text{CDCl}_3$  (●); (----) Dependência linear teórica (sem SP).

Utilizou-se ainda **1** como sonda para investigar misturas de  $\text{CHBr}_3$  com DMA. Verificou-se que o comportamento destas misturas é semelhante àquelas de  $\text{CHCl}_3$  com DMA, mas que a sinergia observada diminui bastante com a troca pelo  $\text{CHBr}_3$ , devido ao fato das interações  $\text{CHBr}_3$ -DMA serem mais fracas que aquelas do DMA com  $\text{CHCl}_3$ .

## Conclusões

O composto **1** não conseguiu diferenciar a LH da ligação de deutério na maior parte das misturas estudadas. A comparação de misturas contendo  $\text{CHBr}_3$  com outras apresentando  $\text{CHCl}_3$  permitiram verificar a importância das LH para a SP de **1**. O uso de outras sondas e também a utilização da técnica de fluorescência devem permitir uma melhor visualização das diferenças de energia relacionadas às LH e às ligações de deutério.

## Agradecimentos

PIBIC/FURB e CNPq.

<sup>1</sup>Reichardt, C.; *Chem. Rev.* **1994**, 94, 2319.

<sup>2</sup>Bevilacqua, T.; Gonçalves, T.F.; Venturini, C. G.; Machado, V.G. *Spectrochim. Acta Part A* **2006**, 65, 535.

<sup>3</sup>Testoni, F.M.; Machado, V.G. 29<sup>a</sup> Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química, Águas de Lindóia, **2005**, FQ-35.