

Acidez e Aromaticidade dos Compostos Fenólicos do LCC em Fase Gasosa

Maron Stanley Silva Oliveira Gomes¹ (IC), Daniel Martins de Brito¹ (IC), José Machado Moita Neto¹ (PQ)

1 - Departamento de Química – Universidade Federal do Piauí – UFPI, CEP 64049 550, Teresina – PI, Brasil.

*E-mail: maronpsi@gmail.com

Palavras Chave: LCC, físico-química orgânica, efeito indutivo.

Introdução

O Líquido da castanha de caju (LCC) é uma fonte rica em compostos fenólicos não isoprenóides, sendo constituído principalmente por ácidos anacárdicos (de 70 a 77% em peso), por cardóis (15 a 20%), por cardanois (5 a 7%), e por material polimérico¹. A importância industrial do LCC pode ser avaliada pela existência de centenas de patentes internacionais. Realizando-se uma busca em um site de pesquisa de patentes pode-se verificar a existência de 226 patentes americanas relacionadas à castanha do caju, que datam desde o ano de 1983². O estudo dos compostos orgânicos em fase gasosa tem mostrado bons resultados, e tem proporcionado o desenvolvimento da físico-química orgânica, e do entendimento da reatividade química desses compostos³.

Resultados e Discussão

A seqüência dos átomos adotada neste trabalho para as estruturas do fenol, ácido salicílico e resorcinol, está mostrada na Figura 1 pois é a porção comum entre todas as moléculas.

Os parâmetros eletrônicos e geométricos de todas as estruturas foram calculados usando o método *ab initio* no nível Hartree-Fock (HF) usando como conjunto de base 6-31G*. O programa computacional utilizado para o cálculo HF/6-31G* foi o PC Spartan.

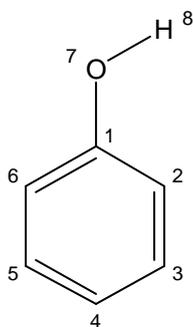


Figura 1. Estrutura comum entre os compostos fenólicos do LCC

Os derivados do fenol não apresentaram diferenças significativas com relação às cargas de Mulliken do 31ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

H8 (+0,456) e comprimentos de ligações, quando comparados entre si, porém observa-se diferenças com relação ao fenol. Não se observou diferenças significativas entre os comprimentos de ligação do O7-H8 das moléculas de cardanol (0,9468), mostrando a pequena influencia do acréscimo de ligações duplas ao substituinte. O resorcinol e seus derivados não apresentaram diferenças significativas com relação às cargas sobre os átomos de oxigênio e hidrogênio, o acréscimo do substituinte não ocasionou mudanças na acidez. A influencia do substituinte hidrocarbônico é desprezível em relação aos dois grupos hidroxila fortemente retiradores nas posições meta.

O substituinte hidrocarbônico doa elétrons por indução ao anel, o efeito de ressonância do grupo ácido retira elétrons do anel, como há uma disponibilidade maior de elétrons devido esta doação, o O7 perde menos densidade eletrônica, e conseqüentemente retirar menos do hidrogênio, ocasionando uma diminuição na acidez do H8 (+0,396) com relação ao mesmo hidrogênio na molécula de ácido salicílico (+0,485), onde o átomo de O7 é fortemente afetado pelo efeito de ressonância no grupo ácido.

Os comprimentos de ligação entre os carbonos do anel não sofreram mudanças significativas, houve somente pequenas alterações nos comprimentos de ligação que envolvem o carbono ligado ao substituinte, logo a aromaticidade não é afetada.

Conclusões

A adição do substituinte provoca uma ligeira diminuição da acidez na maioria dos compostos analisados. A acidez e a aromaticidade dos cardanois e cardóis são pouco afetadas pela presença de insaturações no substituinte, já nos ácidos anacárdicos ocorre uma diminuição da acidez e da aromaticidade.

Agradecimentos

Os autores agradecem ao CNPq, à DQ-UFPI e à FAPEPI pelo apoio.

¹ Lima, S. G.; Macedo, A. O. A.; Citó, A. M. G. L.; Moita Neto, J. M.; Lopes, J. A. D. *Anais da ABQ*, São Paulo, v. 46, n. 3, p. 220-223, 1997.

² PATENT STORM. *Cashew nut*. Washington. Disponível em <<http://www.patentstorm.us>>. Acesso em: 08 nov. **2007**.

³ XUE, Z.; CHENG, J.; CHEN, C. *Journal of Molecular Structure: THEOCHEM*, vol. 763, p. 181-186, **2006**.