

# Solvatocromismo em líquidos iônicos e suas misturas binárias

Bruno M. Sato(PG), Clarissa T. Martins(PQ), Omar A. El Seoud(PQ)\*

Instituto de Química, Universidade de São Paulo, C.P. 26077, 05513-970 São Paulo, S. P., Brasil

\*E-mail: elseoud@iq.usp.br

Palavras Chave: líquidos iônicos, solvatocromismo, misturas binárias

## Introdução

Os líquidos iônicos (LIs) possuem características interessantes de ponto de vista de aplicação, por exemplo, pressão de vapor muito baixa; alta polaridade, e estabilidade química e térmica. São miscíveis, parcialmente ou totalmente, com água e solventes orgânicos, o que amplia suas aplicações como solventes, inclusive para polímeros.

Os LIs, antes de serem empregados em larga escala, necessitam de mais estudos, a fim de se conhecer melhor suas propriedades. Estudos de solvatocromismo nestes solventes, e suas misturas binárias fornecem dados sobre as polaridades destes meios. Os resultados obtidos através desta técnica já foram várias vezes usados como modelos para fenômenos e reações químicas.<sup>1,2</sup> O uso de sondas solvatocrômicas para o estudo da utilização de misturas aquosas de LIs em processos pode ser o primeiro passo para o entendimento das forças atuantes na solvatação.

## Resultados e Discussão

No estudo utilizou-se os LIs cloreto de 1-alil-3-metilimidazólio, AlMelmCl, e o cloreto de 1-alil-3-butilimidazólio, AlBulmCl; e a sonda 2,6-dibromo-4-[(E)-2-(1-metilpiridínio-4-il)etenil]fenolato, MePMBR<sub>2</sub>.

Sabendo que o solvatocromismo descreve o efeito do meio sobre o espectro de absorção ou emissão de sondas. Com base nos dados de  $\lambda_{\text{máx}}$  (da banda de transferência de carga intramolecular da sonda), calcula-se a escala empírica de polaridade,  $E_T$ .<sup>3</sup>

$$1) \quad E_T(\text{sonda}), \text{ kcal/mol} = 28591,5/\lambda_{\text{máx}}(\text{nm})$$

Onde  $E_T(\text{sonda})$  é a diferença de energia de solvatação entre os estados fundamental e excitado da sonda. A tabela 1 mostra os resultados obtidos:

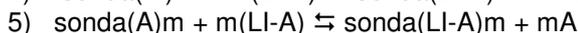
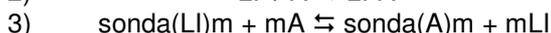
Tabela 1. Valores de  $E_T(\text{MePMBR}_2)$ , a 25°C

Solvente	$E_T(\text{MePMBR}_2)$ . kcal/mol
AlMelmCl	55,95
AlBulmCl	55,02
Etanol <sup>3*</sup>	56,03
1-Propanol <sup>3*</sup>	54,88

\* Estes solventes foram inseridos com intuito comparativo

Observa-se que a polaridade dos LIs estudados é intermediária à dos solventes etanol e 1-propanol.

Para as misturas binárias, o modelo de solvatação utilizado considera os seguintes equilíbrios:<sup>3</sup>



Sendo A, a água; LI-A o “complexo” (via ligação de H) entre os dois solventes e (m) o número de moléculas cuja troca *na camada de solvatação* afeta o valor de  $E_T$ . A partir das misturas binárias, água e LI, obteve-se o seguinte gráfico, figura 1.

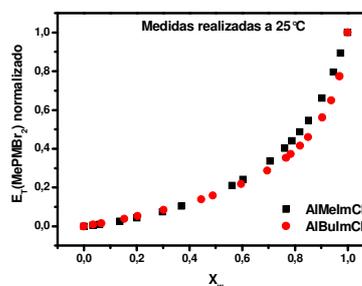


Figura 1. Gráfico  $E_T(\text{MePMBR}_2)$  versus a fração molar de água,  $\chi_w$

Com estes resultados, e o modelo citado, pode-se dizer que a solvatação da sonda é preferencialmente feita pela espécie LI-A. Comparando os dois LIs, observa-se que o comportamento das misturas binárias de AlBulmCl desvia mais da idealidade devido a presença da cadeia butila, que aumenta as interações hidrofóbicas deste LI com a sonda.

## Conclusões

Os LIs estudados são tão polares quanto os solventes clássicos. Além disso, a solvatação preferencial da sonda especialmente pela espécie LI-A, deve-se principalmente às interações hidrofóbicas.

## Agradecimentos

Agradecemos a FAPESP pelo apoio financeiro e pela bolsa de mestrado de B. M. Sato; e o CNPq pela bolsa de produtividade de O. A. El Seoud.

<sup>1</sup> El Seoud, O. A. Pure Appl. Chem., **2007**, 79, 1135

<sup>2</sup> Siviero, F.; El Seoud, O. A. J. Phys. Org. Chem., **2006**, 19, 793.

<sup>3</sup> Martins, C. T., Lima, M. S., El Seoud O. A., J. Org. Chem. **2006**, 71, 9068.