

Considerações sobre a natureza do efeito hidrotrópico

Douglas Silva Machado* (PG)¹, Tatiana Batista (PG)¹, Mario de O. Neto (PQ)², Carla C. C. Schmitt (PQ)¹, Igor Polikarpov (PQ)², Aldo F. Craievich (PQ)³, Miguel G. Neumann (PQ)¹.

machadodouglas@iqsc.usp.br

¹ Instituto de Química de São Carlos / USP

² Instituto de Física de São Carlos / USP

³ Instituto de Física / USP

Palavras Chave: Hidrótropos, Espalhamento de Luz, SAXS.

Introdução

O efeito hidrotrópico é o aumento de solubilidade de uma espécie pouco solúvel em água pela adição de altas concentrações de uma outra espécie, os hidrótropos. Esse aumento de solubilidade ocorre acima de um ponto chamado de concentração hidrotrópica mínima (MHC), similar a CMC (concentração micelar crítica) dos surfactantes. À partir da MHC, assume-se que os hidrótropos organizam-se em agregados¹, sendo atribuídos a este a origem do efeito hidrotrópico em um mecanismo similar ao observado para surfactantes.

Neste trabalho foram estudadas soluções do hidrotropo tolueno sulfonato de sódio (TSS) utilizando-se as técnicas de espalhamento de luz estático, espalhamento de raios-x a baixo ângulo (SAXS) e a altos ângulos (WAXS) de forma a se obter parâmetros sobre a constituição desta solução hidrotrópica.

Resultados e Discussão

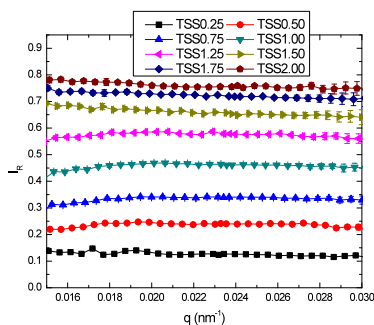


Figura 1. Espalhamento de luz estático para soluções de tolueno sulfonato de sódio a 25°C. As curvas foram normalizadas pelo espalhamento do tolueno nas mesmas condições experimentais.

A Figura 1 mostra as curvas obtidas para TSS, normalizadas pelo espalhamento do tolueno. Não é observada dependência da curva com o ângulo, indicando provavelmente a presença de espécies pequenas. A intensidade extrapolada para baixos ângulos foi grafada segundo a equação (Figura 2):

$$\frac{Kc}{R} = \frac{1}{M} + 2A_2C + 3A_2C^2 \dots$$

Aparentemente existe uma transição de um regime repulsivo para um atrativo evidenciado pela inclinação observada no gráfico.

33ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

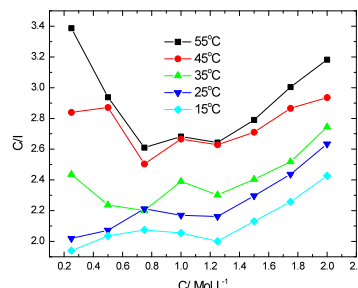


Figura 2. C/I vs. C para tolueno sulfonato de sódio a diferentes temperaturas.

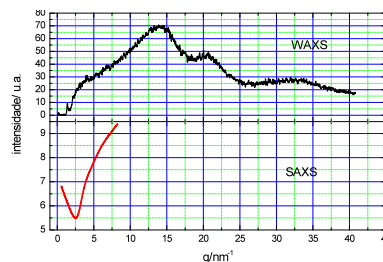


Figura 3. WAXS e SAXS para tolueno sulfonato de sódio 2 Mol L⁻¹

Na Figura 3 pode ser observado o padrão de SAXS e WAXS para TSS 2 Mol.L⁻¹. Observa-se uma banda com máximo ao redor de $q = 13 \text{ nm}^{-1}$, evidenciando uma ordenação das moléculas em torno de 0,5 nm. Desta forma, provavelmente as características hidrotropicas do TSS são devidas a sua capacidade de ordenação a curto alcance, e não pela formação de agregados como os micelares².

Conclusões

Soluções de tolueno sulfonato de sódio mostram ordenação em altos q_s , não sendo observado a formação de espécies mensuráveis em baixos q_s . Supõe-se assim que as características hidrotropicas da molécula advêm de fenômenos de curto alcance, e não pela formação de grandes agregados.

Agradecimentos

CNPq, FAPESP, CAPES

¹ Srinivas, V.; Balasubramanian, D.; Langmuir, 1998, 14, 6658-6661.

² Bauduin, P.; Renoncourt, A.; Kopf, A.; Touraud, D.; Kunz, W.; Langmuir, 2005, 21, 6769-6775.