

Proposta de um experimento didático para explicar escalas de polaridade de solventes eutéticos naturais profundos através de solvatocromismo

Gabriela Eli de Souza Ciarlo, Stanislau Bogusz Junior

Instituto de Química de São Carlos – Universidade de São Paulo

gabrielaciarlo@usp.br

Objetivos

Este projeto de Ensino teve por objetivo propor um experimento didático de medidas de polaridade de solventes orgânicos clássicos e solventes eutéticos naturais profundos (NADES) através de solvatocromismo, a fim de comparar a polaridade desses solventes verdes com solventes orgânicos clássicos estimulando discussões conceituais e a aprendizagem significativa dos alunos.

Métodos e Procedimentos

Os NADES foram preparados pela combinação de aceptores (HBA) e doadores (HBD) de ligações de hidrogênio sob aquecimento a 75 °C por 1 h em banho de ultrassom. Para os NADES hidrofílicos, o cloreto de colina (ChCl, HBA) foi combinado com diferentes HBD (uréia, ácido láctico e glicerol) na proporção 1:2, com adição de 40% (m/m) de água. Para os NADES hidrofóbicos, cada precursor, isto é, ácidos dodecanoico, octanoico, heptanoico, hexanoico, timol, mentol e ácido oleico foram utilizados na proporção 1:1. Todos os NADES sintetizados foram caracterizados quanto ao pH, densidade e polaridade, esta última determinada por solvatocromismo. Para isso, misturaram-se 25 µL da solução etanólica da sonda solvatocrômica de Nile Red (5 mg/mL) ou da sonda solvatocrômica Corante de Reichardt (0,275 mg/mL em acetona) com 1500 µL do solvente de interesse. As amostras foram então vortexadas e os espectros obtidos

em espectrofotômetro UV-vis. A energia de transição (ENR) foi calculada pela expressão:

$$ENR = \frac{28591,44}{\lambda_{\text{máx}}}$$

onde: $\lambda_{\text{máx}}$ é o valor do comprimento de onda do máximo de absorção da banda de transferência de carga do corante (Nile Red ou Corante de Reichardt), e o valor tabelado 28591,44 é proveniente da multiplicação da constante de Planck, velocidade da luz, número de onda da banda de absorção máxima do corante e a constante de Avogadro.

Além disso, como parte das ações deste projeto de ensino foi criada uma página em português de domínio público na Wikipedia sobre solvatocromismo, destinada a servir como ferramenta de aprendizagem para os alunos.

Resultados

Todos os NADES apresentaram caráter ácido, com valores de pH entre 4 e 5, exceto o sistema ChCl:glicerol, que apresentou pH 2,00. Por outro lado, a densidade variou de 0,86 g/mL (timol:ácido oleico) a 1,16 g/mL (ChCl:glicerol). Já os valores de ET(30) oscilaram entre 48,03 e 54,08 kcal/mol, mostrando-se próximos entre si. Esses resultados indicam que o sistema ChCl:ácido láctico é o mais polar, enquanto o sistema C12:C8 é o mais hidrofóbico. Para os solventes orgânicos e água, esta foi a que apresentou

maior valor de $E_T(30)$, 49,57 kcal mol⁻¹ (mais polar). Verificou-se que $E_T(30)$ e constante dielétrica são conceitos relacionados a polaridade, mas a relação entre ambos não é linear. De modo geral, quanto menor a $E_T(30)$, mais polar ou maior é a constante dielétrica. Ademais, a comparação entre os valores de $E_T(30)$ com solventes diferentes não deve ser feita para não gerar conclusões errôneas.

Nas Figuras 1, 2 e 3 podem ser observadas fotos tiradas pela autora para ilustrar as alterações de cor nas amostras provocadas pela polaridade do meio na presença das sondas solvatocrômica.

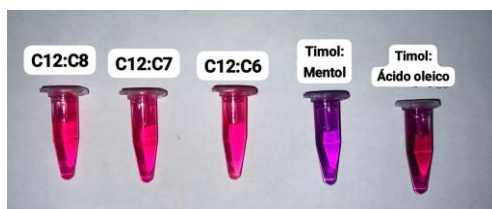


Figura 1: Efeito do solvatocromismo de acordo com a polaridade do meio para os NADES hidrofóbicos utilizando Corante de Reichardt.

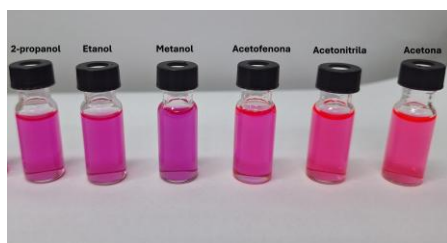


Figura 2: Efeito do solvatocromismo de acordo com a polaridade do meio para os solventes orgânicos utilizando Nile Red.

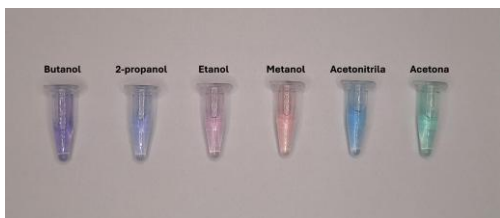


Figura 3: Efeito do solvatocromismo de acordo com a polaridade do meio para os solventes orgânicos utilizando Corante de Reichardt

A página criada em português no site da Wikipedia sobre solvatocromismo serve como material de estudo para a área acadêmica e contribui para a popularização da ciência, tornando temas complexos acessíveis ao público. Acesse a página pelo link: <https://pt.wikipedia.org/wiki/Solvatocromismo>.

Conclusões

Os resultados apresentados demonstram que o conceito de solvatocromismo pode ser utilizado em experimentos didáticos para explicar escalas de polaridade, tanto em solventes orgânicos clássicos quanto em solventes modernos, como os NADES. Essa abordagem constitui uma ferramenta eficaz para o estudo de conceitos fundamentais relacionados à polaridade e mostra potencial para aplicação em disciplinas práticas.

Agradecimentos

Os autores agradecem a USP pela bolsa PUB concedida.

Referências

1. REICHARDT, C., Solvents and Solvent Effects in Organic Chemistry, 2003.
2. PACZKOWSKIA, I.; CAMPOA, L. Solvatocromismo e as escalas empíricas de polaridade do solvente: uma revisão, v. 46, n. 10, 2023.
3. NIGAM, S; RUTAN, S. Principles and Applications of Solvatochromism. Applied Spectroscopy, 55, 11.
4. Fusce purus lorem, pellentesque in condimentum sit amet, pulvinar accumsan enim.
5. BERTOLO, M. et al. Green Strategies for Recovery of Bioactive Phenolic Compounds from Agro-Industrial Wastes Using Natural Deep Eutetic Solvents, v. 3, n. 12, p. 2144-2156, 2023.