

Solvatocromismo de uma série de benzilidenoaminofenolatos nitro substituídos

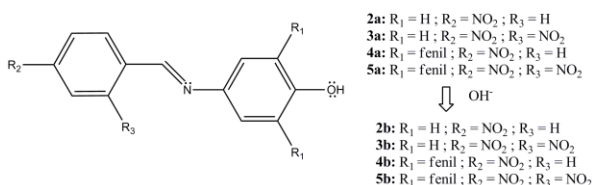
Leandro G. Nandi^{1*} (PG), Felipe Facin¹ (IC), Vanderlei G. Machado¹ (PQ). *leandronandi@gmail.com

¹ Departamento de Química, Universidade Federal de Santa Catarina, UFSC, Florianópolis, SC, 88040-900, Brasil.

Palavras-chave: solvatocromismo, solvatocromismo reverso, benzilidenoaminofenolatos.

Introdução

Muitos compostos são solvatocromicos, i.e., seus espectros de UV/vis variam se a polaridade do meio é alterada.¹ Esses compostos podem assim ser utilizados como sondas para o estudo das interações soluto-solvente e solvente-solvente. Neste trabalho, foi estudado o comportamento de uma série de 4-(4-nitrobenzilidenoamino)fenóis **2a–5a** e suas bases conjugadas (**2b–5b**) como sondas solvatocromicas¹ em 23 solventes diferentes.



Resultados e Discussão

Os compostos **2a–5a** são quase incolores, mas suas soluções tornam-se coloridas quando eles são desprotonados (**2b–5b**). Como se pode observar na **Figura 1**, os compostos **2b–5b** são solvatocromicos, exibindo uma ampla gama de cores em solução.

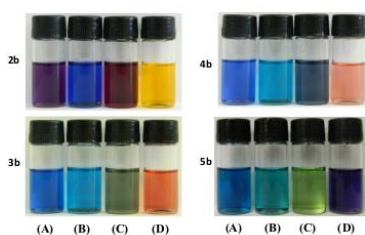


Figura 1. Soluções de **2b–5b** em acetato de etila (A), *N,N*-dimetilacetamida (DMA) (B), acetofenona (C) e metanol (D).

A banda solvatocromica observada nos espectros de UV-vis de **2b–5b** ocorre devido a transições $\pi-\pi^*$, de transferência de carga de natureza intramolecular, do grupo fenolato elétron-doador para o grupo nitro aceitador de elétrons.

Os gráficos de **2b–4b** em 23 solventes mostrados na **Figura 2** indicam um solvatocromismo reverso: os valores de E_T primeiramente decrescem da água para a DMA, i.e., ocorre um deslocamento hipsocromico da banda solvatocromica dos corantes com o aumento da polaridade do meio. No entanto, para solventes com $E_T(30)$ com valores abaixo de 42,9 kcal mol⁻¹ os valores de $E_T(\text{corante})$ aumentam até o solvente

com menor polaridade estudado (*n*-hexano), ocorrendo um deslocamento batocromico na banda solvatocromica dos corantes, quando a polaridade do meio é aumentada.

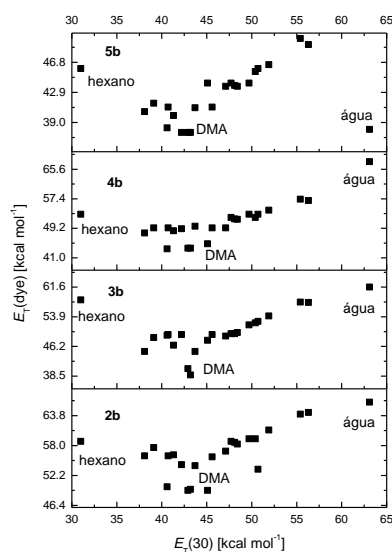


Figura 2. Valores de $E_T(\text{corante})$ para **2b–5b** em vários solventes como uma função de $E_T(30)$.

O corante **5b** tem um comportamento muito semelhante aos outros corantes estudados, mas uma comparação entre metanol e água revela que, em contraste com o comportamento dos outros corantes estudados, uma notável quebra de linearidade é observada, com o valor de E_T diminuindo de 49,9 kcal mol⁻¹ em metanol ($\lambda_{\text{max}} = 572$ nm) para 38,1 kcal mol⁻¹ ($\lambda_{\text{max}} = 750$ nm) em água, correspondendo a um $\Delta\lambda$ de 178 nm.

Conclusões

Os compostos estudados têm potencial para serem aplicados como sondas na investigação de misturas binárias e de outros sistemas, tais como agentes tensoativos em meio aquoso e na micropolaridade de ciclodextrinas, além das suas possíveis aplicações na montagem de dispositivos supramoleculares.

Agradecimentos

À Capes e ao CNPq pelo suporte financeiro.

¹ Reichardt, C. *Chem. Rev.* **1994**, *94*, 2319.