

Síntese de Salicilaldoximas

Eurides Francisco Teixeira Júnior
Bolsista de Iniciação Científica, Instituto de Química, UFRJ

Roberto Rodrigues Coelho
Orientador/CETEM

Angelo da Cunha Pinto
Co-orientador/ UFRJ

Renato Saldanha Bastos
Co-orientador/UFRJ

Resumo

A Salicilaldoxima é uma molécula importante devido ao seu poder complexante com metais. Dependendo dos substituintes utilizados na proporcionalmente à densidade de carga da região de captura do metal, O aumento da concentração de carga na região entre a hidroxila fenólica e o nitrogênio faz com que aumente o efeito extratante de metais. Ou seja, dependendo dos substituintes esta propensão à formação de complexos pode ser maximizada, este trabalho visa a síntese de moléculas com essas características, com a preocupação de eliminar ou reduzir a formação de resíduos.

1. Introdução

Na formação de complexos de coordenação existem diversos fatores que influenciam a eficiência da reação, dentre os quais podemos destacar a densidade de carga negativa no sítio da molécula que ataca o metal, conforme a teoria de Lewis para reações ácido-base (Chagas, 2000). As hidroximas aromáticas são um exemplo de compostos que podem agir como extratantes de metais a partir da formação de um complexo com estes (Somasundaran, 1987). Na salicilaldoxima, este efeito é aumentado devido a uma concentração de carga na região entre a hidroxila fenólica e o nitrogênio, conforme ilustra a Figura1.

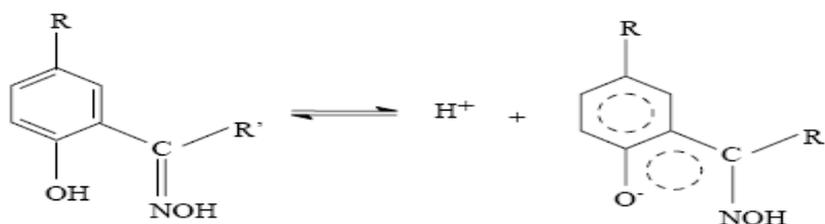


Figura 1. Salicilaldoxima

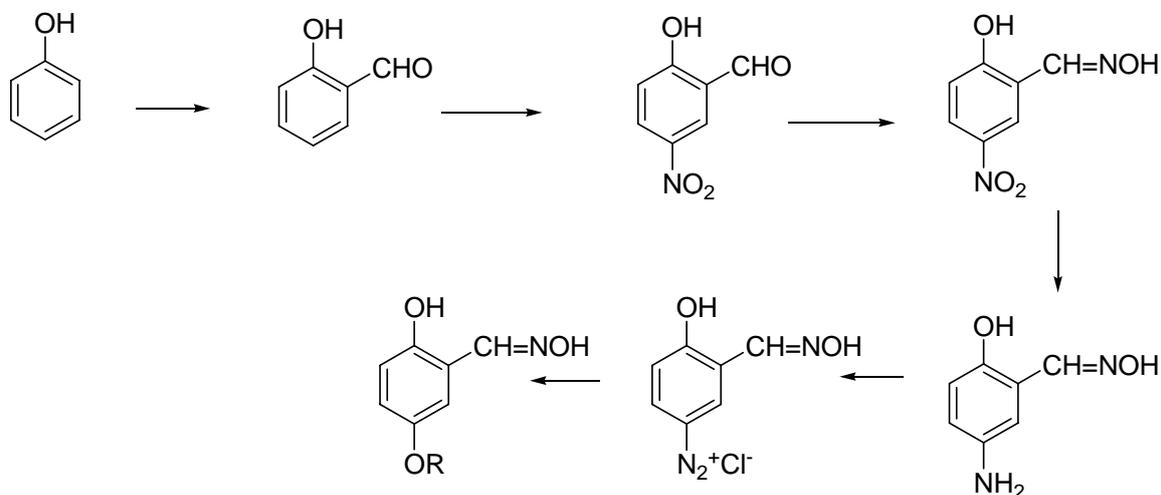
Dependendo dos substituintes (representados na Figura 1 por R e R'), esta propensão à formação de complexos pode ser maximizada. No trabalho realizado por Elaine Fiad (Fiad, 2000), foram comparadas as densidades de carga da salicilaldoxima utilizando-se diferentes substituintes em diferentes posições com o software HyperChem 5.1, e chegou-se a quatro compostos com os valores mais significativos: 3-heptil-7-metoxi-salicilaldoxima, 5-nonil-7-metoxi-salicilaldoxima, 5-dodecil-7-metoxi-salicilaldoxima e 3-heptoxi-4-metilamino-7-metoxi-salicilaldoxima. Assim, a partir desses compostos estamos sintetizando-os a fim de que, testando as suas capacidades de extração em laboratório, se possa confrontá-los com os resultados teóricos obtidos, além de avaliar a sua aplicação na indústria mineral. A partir de pesquisa no aplicativo *Science finder* e em outras fontes; fundamentamos e estruturamos esse projeto de acordo com a rota proposta a seguir.

2. Objetivo

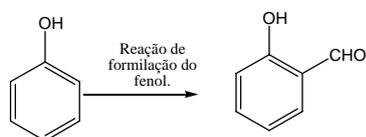
O objetivo deste trabalho é desenvolver a síntese de derivados de salicilaldoximas a partir do fenol e de seus derivados, com um estudo criterioso das condições reacionais de cada etapa, buscando a eliminação ou redução de resíduos químicos.

3. Metodologia

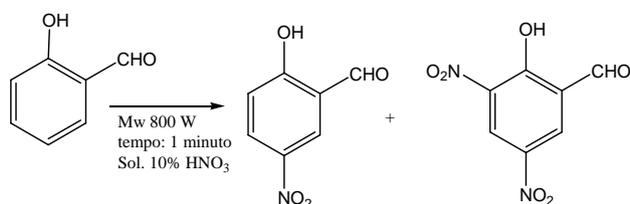
A metodologia que este trabalho de síntese pode ser resumida no seguinte fluxograma das reações abaixo:



1º etapa - formação do fenol



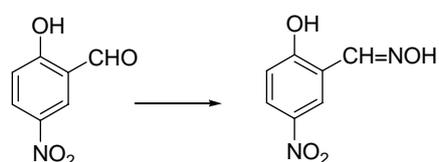
2º etapa - Etapa de Nitração do Salicilaldeído. Esta etapa foi desenvolvida com o uso de energia microondas e uma solução a 10% de ácido nítrico no período de 1 minuto. A mesma reação foi proposta como um Experimento para alunos de Graduação em disciplinas Experimentais.



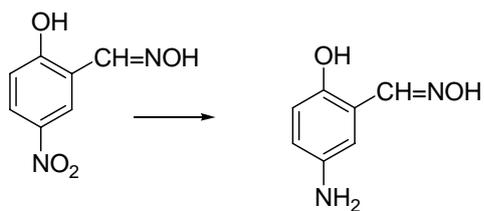
3º etapa - Etapa de Separação do Isômeros 3 e 5 nitrosalicilaldeído

Essa etapa foi realizada por mudança de pH do meio, ou seja a mistura dos dois isômeros foi solubilizada numa solução de hidróxido de sódio a quente, e deixou-se esfriar, de modo que apenas o isômero 5-nitrosalicilaldeído precipitou, em seguida foi feita a filtração, e por fim a protonação de ambos os isômeros com uma solução de ácido clorídrico.

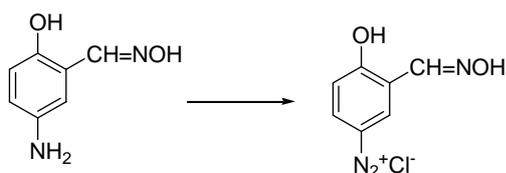
4º etapa -Formação da Oxima



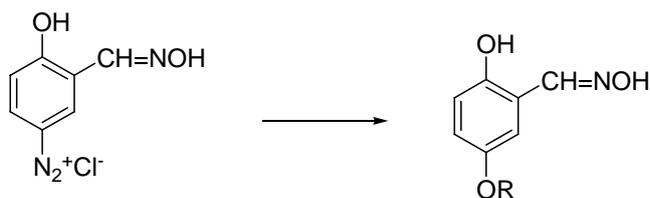
5º etapa - Redução do grupamento nitro usando hidrogenação catalítica.



6º etapa – Reação de formação do Sal de diazônio



7º etapa – Acoplamento de diferentes substituintes nas posições 3 e 5.



4. Resultados e discussão

Após cada experimento foi realizada a formação do composto pretendido, e a confirmação do mesmo através de testes como ponto de fusão, cromatografia em camada fina e análises pelos seus respectivos espectros de Infravermelho e Ressonância Magnética Nuclear de Carbono e Hidrogênio.

5. Conclusão

Após as devidas análises, conclui-se que o projeto de síntese vem cumprindo o objetivo proposto de sintetizar as moléculas requeridas ou o mais próximo possível das mesmas, buscando reações limpas e práticas, de modo a evitar ou eliminar resíduos químicos. Ressaltando que o projeto se encontra na reta final da síntese de um dos primeiros compostos, o qual será enviado para teste no Centro de Tecnologia Mineral.

6. Agradecimentos

Desde já agradeço aos professores Angelo da Cunha Pinto e Roberto Coelho pela confiança em mim depositada e também a todo apoio prestado pelos colegas do laboratório 621 do Instituto de Química da Universidade Federal do Rio de Janeiro, e ao CNPQ, pelo apoio financeiro.

7. Referências bibliográficas

CHAGAS, A.P. O Ensino de Aspectos Históricos e Filosóficos da Química e as Teorias Ácido-Base do Século XX, **Química Nova**, no 23, pp.126-133, 2000.

FIAD, E. Otimização Teórica da Capacidade de Complexação com Metais da Salicilaldoxima, **Jornada de Iniciação Científica CETEM**, 2000.

MANO, ELOISA; SEABRA, AFFONSO; **Práticas de Química Orgânica**, 3a Edição, 1987.

MORRISON AND BOYD ; **Química Orgânica**, Edição 8a , 1997

SOLOMONS, T. W. G; **Química Orgânica.**, 6a Edição. São Paulo: Livros Técnicos e Científicos, 1996, Vol. 1 a 3

SOMASUNDARAN, P. and MOUDGIL, B., **Reagents in Mineral Technology**, Marcel Dekker Inc, c.9, pp. 257-327, 1987.

VOGEL , A ; **Química Orgânica - Análise Orgânica Qualitativa- PRÁTICAS** - Volumes I, II, III Ao livro técnico, 1971.