Constante de partição da acetofenona em octanol (P)

Material

1. Espectrofotômetro, ThermoMixer, centrífuga, pipetas Pasteur, microtubos Eppendorf e tubos de vidro
2. Acetofenona, octanol pré-saturado em água
3. Amostras de água e água deionizada

Princípio

A partição da acetofenona em água e octanol é determinada pela relação de concentrações deste composto nas fases orgânica e aquosa. Estas são obtidas por espectrofotometria de cada amostra em água (245 nm).

Procedimento

Dissolva 65 µL de acetofenona em 20 mL da amostra de água ou de água deionizada. Adicione 2,5 mL da solução em um tubo do ThermoMixer, seguido de 0,5 mL de octanol pré-saturado e tampe o tubo. Mantenha a mistura agitando no ThermoMixer a 300 rpm e 25ºC por 1 h. Posteriormente, transfira a fração aquosa para um microtubo Eppendorf com o auxílio de uma pipeta e centrifugue por 5 min a 150000 rpm para retirar octanol restante. Medir absorbâncias no espectrofotômetro UV-Vis em 245 nm antes e depois da partição, determinando os brancos para água destilada e amostra de água. Calcule a concentração de acetofenona na fase octanol com base na concentração da fase aquosa e obtenha o valor do coeficiente de partição.

Observação: Adicione 5 mL de água deionizada no compartimento do tubo do Thermomixer antes de agitar para proporcionar uma melhor troca de calor.

Tabela 8. Dados do experimento para determinação da constante de partição de acetofenona em amostras de água*.

$Abs_{água\text{-}início}$	
água deionizada	amostra
$Abs_{água\text{-}fim}$	
água deionizada	amostra
$C_{acetofenona}$ (octanol)	
água deionizada	amostra
$C_{acetofenona}$ (água)	
água deionizada	amostra
$K_{ow} = C_{acetofenona}$ (octanol)/ $C_{acetofenona}$ (água)	
água deionizada	amostra

* logP de acetofenona é 1,73 ± 0,5, ε = 13.485 $M^{-1}cm^{-1}$.

Pergunta(s) Pré-laboratório

1. O que significam valores de logP maiores e menores do que zero?
2. Qual a importância de pré-saturar a fase orgânica?
3. Qual a importância de se medir o branco da amostra do lago?
4. Qual outro método poderia ter sido empregado para o cálculo da constante de partição em amostras de água?

Tarefas Pós-laboratório

1. Determine o logP da acetofenona para cada uma das amostras de águas.
2. Compare o valor determinado em água pura com o valor da literatura. Na sequência, compare com os valores das amostras. Faça os comentários que julgar pertinentes.
3. Ache um artigo na literatura que comente a partição de compostos em amostras ambientais de água. Compare a técnica empregada.