

Solubilidade de Compostos Orgânicos

1. INTRODUÇÃO

A solubilidade pode ser definida como sendo a quantidade máxima de uma substância que pode ser completamente dissolvida em um dado volume de solvente. Apesar da abordagem superficial envolvendo este conceito em livros de Química geral, trata-se de um conteúdo fundamental em diferentes áreas como é o caso de materiais, alimentos, farmacêutica e ambiental (GONG et al., 2007). No caso específico de fármacos é de suma importância avaliar a solubilidade aquosa dos mesmos, já que precisam ser considerados os processos durante a sua absorção, distribuição, metabolismo e até a excreção. E de modo similar, é o caso da relevância de se compreender a solubilidade dos compostos contaminantes, poluentes ou agrotóxicos, a fim de se prever o comportamento dos mesmos (KATRITZKY et al., 2013).

Investigar as características de solubilidade de algumas moléculas orgânicas simples e observar as relações entre as propriedades de solubilidade de uma molécula orgânica e sua estrutura ou vice-versa se faz importante, pois permite compreender a estrutura de uma molécula, principalmente no que se diz respeito à polaridade das ligações e suas interações intermoleculares. Saber a função orgânica de uma dada molécula permite entender suas propriedades como solubilidade, acidez ou basicidade, estabilidade, reatividade etc. Prever a solubilidade de uma molécula orgânica é uma habilidade extremamente útil durante os processos de purificação, isolamento e/ou extração. Por exemplo, é importante conhecer estrutura da molécula e bem como suas propriedades físicas para se selecionar o solvente adequado durante o processo de recristalização; para se extrair uma molécula a partir de uma mistura de reação de múltiplos componentes; para se extrair uma molécula oriunda de uma fonte natural, ou ainda para se projetar ou sintetizar uma nova molécula orgânica que seja solúvel na corrente sanguínea (aquosa e alcalina) ou no estômago (aquoso e ácido).

A ausência ou presença de grupos funcionais em moléculas orgânicas pode promover diferenças na polaridade das mesmas, a qual pode ser evidenciada através de experimentos envolvendo a avaliação da solubilidade do composto analisado.

A maioria das moléculas orgânicas são relativamente não-polares, e são usualmente solúveis em solventes orgânicos e baixa solubilidade em água. Contudo, algumas moléculas orgânicas podem ser mais polares e, portanto, mais solúveis em água, como é o caso da

presença de grupo (s) polar (es), -OH, -NH₂ ou -CO₂H em uma cadeia carbônica. A presença de um grupo funcional ácido como -CO₂H ou básico como -NH₂ de um composto poderá ser detectado através da medida do valor pH da solução (BRITTAIN, 2007).

O presente experimento permitirá o teste de solubilidade de uma série de compostos orgânicos contendo uma variedade de grupos funcionais comuns na série de sete sistemas de solventes. Cada teste permitirá que você classifique o composto orgânico como solúvel ou insolúvel em cada um dos solventes testes.

1. METODOLOGIA

1.1. Materiais

- (H₂SO₄) Ácido sulfúrico (concentrado);

- 01 estante de tubos de ensaio;
- Pipetas Pasteur descartáveis de 1 mL
- Espátulas
- Peras
- Pipetas graduadas de 1 e 5mL
- Tubos de ensaio enumerados de 1 a 10
- Fita de medição de PH

1.2. Reagentes

- Água destilada;
- Éter;
- (HCl) Ácido clorídrico 5%;

- (NaHCO₃) Bicarbonato de Sódio 5%;
- (H₃PO₄) Ácido fosfórico (85 %);
- (NaOH) Hidróxido de Sódio 5%;

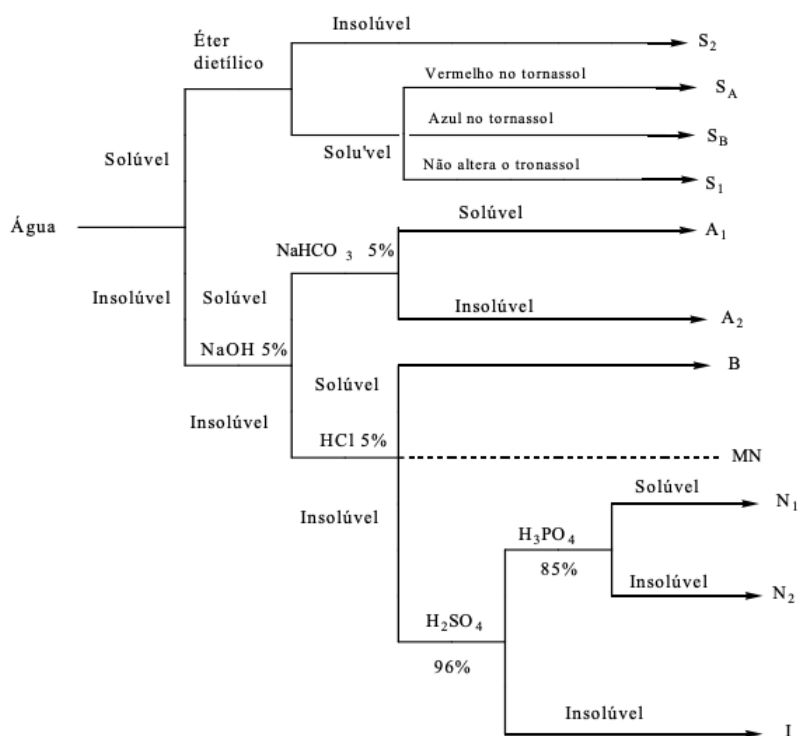
1.3. Procedimento

Você receberá 2 amostras não identificadas para realizar o estudo de solubilidade. O estudo será realizado com vários solventes, tais como: água, éter, ácido clorídrico 5 %,

hidróxido de sódio 5 %, bicarbonato de sódio 5 %, ácido sulfúrico concentrado e ácido fosfórico 85 %. Utilize a Figura (1) para auxiliá-lo na realização do experimento. Após testar os solventes, você deverá localizar a amostra em um determinado grupo, através da Tabela 1.

Empregar 0,1 g de sólido ou 0,2 mL de líquido para 3 mL de solvente utilizando tubos de ensaio e siga o esquema da Figura 1, com os procedimentos de solubilização descritos abaixo:

Figura 1: Esquema para investigação de Solubilidade



- **Água:** solubilize a amostra sólida com porções sucessivas de 1,0 mL de água, agitando vigorosamente após cada adição, até que se complete os 3,0 mL. Caso o composto não se dissolva por completo em 3,0 mL de água, pode-se considerá-lo insolúvel. Quando se tratar da amostra líquida, adicione 0,2 mL do composto a 3,0 mL de água e agite.
- **Éter:** Pese uma nova alíquota e proceda exatamente como no ensaio da solubilidade em água.
- **Hidróxido de Sódio 5%:** Observe se ocorre qualquer aumento da temperatura. Caso o composto pareça insolúvel, remova um pouco do líquido sobrenadante (cerca de 1 mL) através de um a pipeta para um outro tubo de ensaio, adicione ácido clorídrico 5 %, até que a solução esteja ácida e procure observar se ocorre formação de qualquer precipitado ou turvação.

- ***Bicarbonato de Sódio 5 %:*** Caso o composto seja solúvel em solução de hidróxido de sódio 5 %, teste com a solução de bicarbonato de sódio 5 %. Observe se ele se dissolve e se ocorre o desprendimento *imediate* de dióxido de carbono, que pode ser observado através da presença de bolhas (indicativo da presença de ácidos carboxílicos, ácidos sulfônicos ou fenóis substituídos) ou *depois* de um período de tempo (indicativo da presença de alguns aminoácidos).
- ***Ácido clorídrico 5 %:*** Adicione o ácido a 0,1 g de sólido ou 0,2 mL do líquido em porções de 1,0 mL com agitação até que os 3,0 mL tenham sido adicionados. Algumas bases orgânicas formam cloridratos que são solúveis em água, mas se precipitam com um excesso de ácido e observe se ocorre formação de solução a qualquer momento. Se o composto parecer insolúvel, remova um pouco do líquido sobrenadante para outro tubo de ensaio e adicione solução de hidróxido de sódio 5 %, até que a solução se apresente alcalina (medir o pH com papel indicador), e observe se há formação de algum precipitado.
- ***Ácido sulfúrico concentrado:*** Adicione 3,0 mL de ácido sulfúrico concentrado em um tubo de ensaio seco e adicione 0,1 g ou 0,2 mL da amostra. Caso o composto não se dissolva *imediatamente*, agite por algum tempo. Observe qualquer variação na cor, carbonização, desprendimento de produtos gasosos, precipitação, etc.
- ***Ácido fosfórico 85 %:*** Este teste somente deve ser realizado se o composto for solúvel em ácido sulfúrico concentrado. Coloque 3,0 mL de ácido fosfórico a 85 % num tubo de ensaio **seco** e adicione 0,1 g ou 0,2 mL da amostra. Se o composto não se dissolver imediatamente, agite durante algum tempo e a classifique.

Após, através da solubilidade do composto, determinar-se o grupo, consulte a Tabela I para verificar a que classes de compostos sua amostra poderá estar contida.

TABELA I: Divisão dos compostos orgânicos em grupos de solubilidade.

Grupo	Descrição
S2	Sais de ácidos orgânicos, cloridratos de aminas, aminoácidos e compostos polifuncionais.
SA	Ácidos monocarboxílicos com cinco átomos de carbono ou menos e ácidos arenossulfônicos.
SB	Aminas monofuncionais com seis átomos de carbono ou menos.
S1	Alcoóis, aldeídos, cetonas, ésteres, nitrilas e amidas, com cinco átomos de carbono ou menos (monofuncionais).
A1	Ácidos orgânicos fortes: ácidos carboxílicos com mais de seis átomos de carbono, fenóis com grupos eletrofilicos em posição <i>orto</i> , <i>para</i> , e β -dicetonas.

A2	Ácidos orgânicos fracos: fenóis, enóis, oximas, imidas, sulfonamidas, tiofenóis, todos com mais de cinco átomos de carbono. Incluem-se também as β -dicetonas, os compostos nitro com hidrogênio em β e as sulfonamidas.
B	Aminas alifáticas com oito ou mais carbonos, anilinas (somente um grupo fenil ligado ao nitrogênio) e alguns oxiéteres.
N1	Álcoois, aldeídos, metilcetonas, cetonas cíclicas e ésteres com um só grupo funcional e mais de cinco e menos que nove átomos de carbono. Éteres com menos de oito átomos de carbono e epóxidos.
N2	Alquenos, alquinos, éteres, compostos aromáticos (especialmente os que têm grupos ativantes) e cetonas (exceto as da classe N1).
I	Hidrocarbonetos saturados, alcanos halogenados, haletos de arila, éteres diarílicos e compostos aromáticos não-ativos.
MN	Diversos compostos neutros, com mais de cinco átomos de carbono, contendo nitrogênio ou enxofre (esta informação deve ser obtida por meio de análise elementar).

Tabela 2: Anote suas solubilidades

Amostra	Água	Éter	NaOH	HCl	NaHCO ₃	H ₂ SO ₄	Grupo

OBSERVAÇÃO: Para facilitar a determinação do grupo de solubilidade bem como minimizar o tempo no laboratório algumas informações sobre as amostras avaliadas serão fornecidas:

2. TOXICIDADE

ÁCIDOS: ação corrosiva sobre a pele, mucosas, olhos, tecidos respiratórios e digestivos. A intensidade depende da natureza do ácido, concentração, tempo de contato.

- Ácido clorídrico

Os vapores são irritantes às vias respiratórias. Pode causar lesões aos olhos e perda total de visão. Concentrado pode causar lesões e queimaduras na pele, diluído pode levar a desenvolvimento de dermatites. Os vapores são irritantes às vias respiratórias, causando laringite, bronquite, edema de glote, edema pulmonar e morte; os dentes podem ficar amarelados, amolecidos, desgastando e até quebrar. Por ingestão pode provocar queimaduras na mucosa da boca, esôfago e estômago.

- Ácido sulfúrico

Em contato com a pele pode originar ulcerações e destruição dos tecidos; em contato com os olhos produz lesões graves na córnea e cegueira. Os vapores provocam irritação das mucosas do nariz, olhos, garganta, edemas agudos nos pulmões, laringe e possível morte.

Corrosão nos dentes é observada frequentemente.

Por ingestão acidental, provoca graves queimaduras nas mucosas da boca, garganta, esôfago, estômago, perfurações digestivas, diarreia e morte.

- Ácido fosfórico

Geralmente é usado em solução aquosa. Corrosivo para pele, olhos e mucosas. Libera vapores tóxicos com aquecimento.

BASES:

- Hidróxido de Sódio

Sua inalação provoca danos no trato respiratório até pneumonite grave. Corrosivo para todos os tecidos, chegando a ser fatal. Em contato com os olhos causa opacidade de córnea, edema pronunciado, ulcerações e até cegueira.

3. CUIDADOS

- Trabalhos com líquidos inflamáveis voláteis devem ser realizados em capelas com sistema elétrico a prova de explosão.

- O aquecimento de líquidos inflamáveis deve ser feito em banho-maria ou em balões com mantas aquecedoras.

Referências:

AUGUSTIJNS, P. & BREWSTER, M. Principles of Solubility. In: AUGUSTIJNS, P. & BREWSTER, M. (Ed.): **Solvents Systems and Their Selection in Pharmaceutics and Biopharmaceutics**. v. 6. New York: SPRINGER, 2007, cap. 1

BRITTAIN, H. G. Ionic Equilibria and the pH dependence of solubility. In: AUGUSTIJNS, P. & BREWSTER, M. (Ed. **Solvents Systems and Their Selection in Pharmaceutics and Biopharmaceutics**. v. 6. New York: SPRINGER, 2007, cap. 2.

KATRITZKY, A. R.; KUANAR, M.; SLAVOV, S.; HALL, C. D.; Quantitative correlation of physical and chemical properties with chemical structure: utility for prediction. **Chem. Rev.** 2010, *110*, 5714-5789.

GRUPOS DE FUNÇÕES. Disponível em:

<http://www.chem.ucalgary.ca/courses/351/WebContent/orgnom/functional/func.html> Acessado em: 16. Abr.2019
