

221

EFEITO DO SUBSTITUINTE NA EXTRAÇÃO DE METAIS ALCALINOS POR CALIXARENOS. Marjorie Marrie Francisco, Rodrigo Paliga da Rosa, Francine Furtado Nachtigall, Marcio Lazzarotto (orient.) (UFRGS).

A interação entre acetatos de calixarenos e metais alcalinos se dá através dos oxigênios fenólicos e carbonílicos com a carga positiva do metal. Com a finalidade de avaliar a dependência da carga, sintetizamos ésteres fenólicos substituídos na posição *para*, e determinamos a suscetibilidade da extração do metal ao efeito do substituinte. As constantes de extração água/diclorometano foram obtidas acompanhando a partição do picrato metálico nas fases, determinando a sua concentração na fase orgânica pela absorbância a 410 nm e a constante foi calculada, levando em conta as atividades em fase aquosa. Gráficos que relacionam a capacidade de extração com os parâmetros $sp+ s$, foram construídos e as correlações avaliadas para os derivados com R= OMe, Me, t-Bu, Ph, H, Cl e NO₂ para os metais alcalinos Li, Na, K, Rb e Cs. A análise dos dados revela uma dependência entre a densidade eletrônica e a constante de extração. O valor negativo de r indica que substituintes doadores de elétrons estabilizam o complexo, aumentando a densidade eletrônica sobre o grupo C=O, aumenta a interação ligante-metal. Esta tendência existe para todos os metais, embora os valores de r diminuam. Contudo, existe um ponto que fica fora da linha reta para todos os metais utilizados, quando R= Ph. Propomos que essa discrepância venha de uma diminuição na constante de descomplexação, porque com o rearranjo molecular na complexação, as bifenilas que ficam em posição perpendicular uma em relação à outra fecham o metal no interior, impedindo a sua saída. Por fim, concluímos que a complexação entre metais alcalinos e calixareno-acetatos depende de fatores eletrônicos de forma geral e estruturais em casos específicos, no caso do derivado de fenil-fenol. (PIBIC).

