

Figura 4 - O Botão Library mostra o conteúdo da biblioteca selecionada em arquivo texto

5. CONCLUSÕES

O Banco de Dados conseguiu integrar, de acordo com as relações entre as tabelas, os programas da Modelagem Molecular com seus comandos, informações químicas, ambientes de desenvolvimento, desenvolvedores, usuários, parâmetros e bibliotecas de comandos.

Foi permitido que novos dados fossem solicitados, bem como sua localização dentro do Banco de Dados.

As bibliotecas a serem criadas puderam ser associadas ao aplicativo.

BIBLIOGRAFIA

1. LONGO, MAURÍCIO B. Delphi 3.0 Total - Dominando a Ferramenta, Brasport, 1997.
2. LONGO, MAURÍCIO B. Delphi 3.0 Total - Aplicações de Banco de Dados, Brasport, 1997.

Otimização, Via Modelagem Molecular, das Estruturas do 8-Quinolinol, Visando a Obtenção de Extratantes Iônicos de Alto Rendimento

Débora Mantovani Ahumada
Bolsista de Inic. Científica, Eng. Química, UERJ

Roberto Rodrigues Coelho
Orientador DSc

RESUMO

Diversas 8-hidroxiquinolinas substituídas foram estudadas utilizando cálculos semi-empíricos. Os cálculos da densidade de carga dos átomos do nitrogênio quinolínico e do oxigênio fenólico dessas 8-hidroxiquinolinas mostraram que é possível avaliar suas capacidades de complexação iônica. Isto permitiu propor estruturas que, teoricamente, tenham alto rendimento como extratantes em hidrometalurgia extrativa.

1. INTRODUÇÃO

As 8-hidroxiquinolinas substituídas, contendo um grupo hidrofóbico como um dos substituintes, são conhecidas como bons extratantes e têm grande aplicabilidade na área de extração de metais por solventes (1,2,3). As 7-alkil-8-hidroxiquinolinas (Kelex) são utilizadas, normalmente, em escala industrial, para recuperação de cátions de metais de alto valor agregado, a partir de lixívia resultantes do processo de obtenção de sulfato de cobre e de outras contendo vanádio ou terras-raras (4,5).

Neste trabalho estudou-se teoricamente as diversas oxinas substituídas, buscando-se aquelas estruturas químicas que apresentassem maior poder complexante.

2. OBJETIVO

Estudar teoricamente, a partir do cálculo da variável "densidade de carga" do nitrogênio quinolínico e do oxigênio fenólico, diversas moléculas das 8-hidroxiquinolinas substituídas, de modo a se otimizar aqueles substituintes que conferem à molécula um alto poder quelante.

3. MATERIAIS E MÉTODOS

Os Programas utilizados para os cálculos teóricos dos compostos considerados foram o MM2 (mecânica molecular) e o AM1 (semi-empírico), ambos constituintes do HIPERCHEM 4.5 da Hypercube Inc., adaptado para computador PC, em ambiente Window.

4. RESULTADO E DISCUSSÃO

7-nonil-8-quinololol

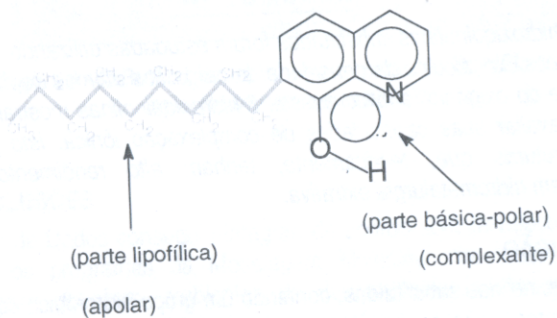


Figura 1 – Molécula do 7-nonil-8-quinololol

A Figura 1 exemplifica a molécula do 7-nonil-8-quinololol, na qual estão indicados os átomos de nitrogênio e oxigênio que agem como complexantes, e para os quais foram calculadas as densidades de carga correspondentes. Destaque foi dado para a parte lipofílica da estrutura molecular, pela sua importância para extrair os complexos da fase aquosa.

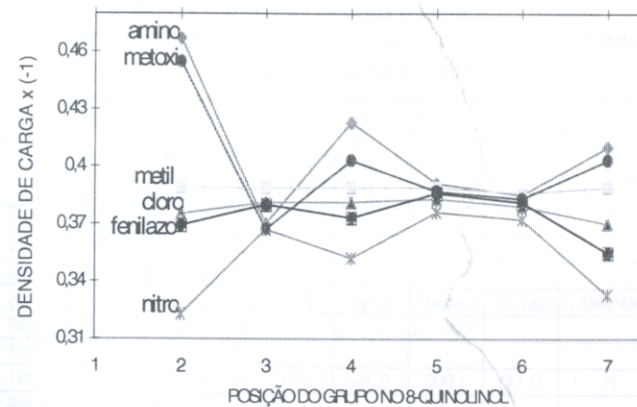


Gráfico 1

O Gráfico 1 mostra a soma da densidade de carga do nitrogênio quinolínico e a do oxigênio fenólico contra a mono substituição dos grupos substituintes (amino, metoxi, metil, cloro, fenilazo e nitro) em todas as possíveis posições da 8-hidroxiquinololol, conforme a Figura 2.

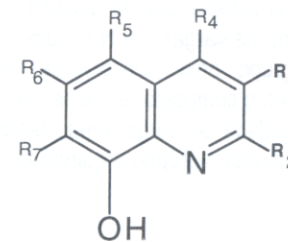


Figura 2

No referido Gráfico observa-se que os grupos que conferiram ao 8-quinolololol os mais altos níveis de densidade de carga foram os grupos amino e metoxi quando substituídos nas posições $2 > 4 > 7$. Em face destes resultados, os referidos grupos foram tomados como base para o cálculo dos mono e dissustituídos.

Tabela 1 - Análise comparativa entre as cargas do n(1) dos 8-quinolínios mono substituídos com as cargas do n(1) dos di substituídos onde um dos substituintes é o grupo hexil

Posição	Substituinte	H				Posição	HEXIL			
		N		N+O			N		N+O	
		A	B	A	B		A	B	A	B
2	METÓXI	-0,209	1,482	-0,455	1,179	4	-0,211	1,496	-0,457	1,184
						3	-0,210	1,489	-0,456	1,181
						5	-0,210	1,489	-0,455	1,178
						7	-0,210	1,489	-0,455	1,178
2	AMINO	-0,218	1,546	-0,467	1,210	4	-0,201	1,425	-0,448	1,161
						5	-0,201	1,425	-0,448	1,161
						7	-0,201	1,425	-0,447	1,158
						4	-0,145	1,028	-0,391	1,013
	H	-0,141	1,000	-0,386	1,000	2	-0,144	1,021	-0,389	1,008
						5	-0,143	1,014	-0,388	1,005
						3	-0,141	1,000	-0,386	1,000
						6	-0,140	0,993	-0,380	0,984

A = densidade de carga calculada pelo programa AM1

B = razão entre A e a densidade de carga calculada para o 8-quinolínol

A tabela acima permite a análise comparativa entre as cargas do nitrogênio (1) dos 8-quinolínios mono substituídos na posição 2, posição de mais alta densidade de carga, com as cargas do N (1) dos di substituídos onde um dos substituintes é o grupo hexil. Observa-se nesta tabela que o 2-metoxi-4-hexil-8-quinolínol é o composto, entre os estudados, que apresentou o mais alto nível de densidade de carga, tendo teoricamente um poder de complexação 50% maior do que o próprio 8-quinolínol.

5. CONCLUSÕES

A aplicação de modelagem molecular para a análise do poder de complexação iônica de extratantes minerais tem se revelado uma ferramenta apropriada. Os cálculos feitos convergiram para caracterizar, quantitativamente, o efeito dos grupos metoxi e amino como eletroalimentadores do nitrogênio quinolínico. Por outro lado, permitiu apontar, dentre as sete estruturas calculadas, que o 2-metoxi-4-hexil-8-quinolínol é o melhor complexante, no caso dos di substituídos.

BIBLIOGRAFIA

- CHEMICAL Engineering News, Apr. 7, pg. 62, 1967
- CHEMICAL Engineering News, Oct. 18, pg. 48, 1965
- CHEMICAL Engineering News, Mar. 11, pg. 44, 1968
- BUDDE, W. M. ET ALLI. Beta-Alkenyl Substituted 8-Hydroxyquinolines. U.S. Pat. 3.637.711, 1972
- OHASHI, K. et alli. Effect of Alkyl Substituents on the Selective Extraction of Copper(II), Palladium(II), Gallium (III) and Molybdenum(VI) with Novel 8-Quinolínol Derivatives. Min.Pro.Met. Rev.,v. 17, p. 169-194, 1997.