



XIV Seminário de Iniciação Científica
Universidade Federal de Juiz de Fora
15 a 17 de outubro de 2008



Área: Ciências Exatas e da Terra

Projeto: CARACTERIZAÇÃO DE NOVOS MATERIAIS POR ESPECTROSCOPIA RAMAN

Orientador: Luiz Fernando Cappa De Oliveira

Bolsistas:

Tatiana Das Chagas Almeida (XX BIC)

Renata Braga Soares (XX BIC)

Participantes:

Íons oxocarbonos são espécies divalentes cíclicas de fórmula geral $C_nO_n^{2-}$, onde n varia de 3 a 6, correspondendo respectivamente aos íons deltato, esquarato, croconato e rodizonato. A família dos oxocarbonos vem despertando grande interesse nos últimos anos uma vez que apresentam estruturas planas, altamente simétricas e principalmente porque apresentam certa deslocalização eletrônica que confere propriedades interessantes a esses compostos **1**.

A substituição de um ou mais átomos de oxigênio dos íons oxocarbonos formam uma classe de compostos denominada de pseudooxocarbonos. A substituição por grupos doadores ou receptores de densidade eletrônica pode alterar as interações p-p entre os anéis, alterando o empacotamento cristalino. A substituição dos átomos de oxigênio por grupos dicianometileno ($-C(CN)_2$) no íon croconato ($C_5O_5^{2-}$) forma uma classe interessante de compostos coloridos denominados de croconato violeta **2 bis(dicianometileno)croconato – $C_5O_3(C(CN)_2)_2^{2-}$** e croconato azul **3 tris(dicianometileno)croconato - $C_5O_2(C(CN)_2)_3^{2-}$** . Essas espécies apresentam forte absorção na região do ultravioleta-visível e por isso são denominadas de pigmentos. Estudos estruturais e espectroscópicos de sais de potássio-rubídio, rubídio, potássio-césio e césio do croconato violeta **4** foram realizados pelo nosso grupo. Com exceção do sal de césio, os sais obtidos são isoestruturais ao sal de potássio **5**, indicando que o empacotamento cristalino deste íon não sofre modificações pela mudança do cátion.

Outra classe interessante de pseudooxocarbonos é a dos derivados dicianometileno do íon esquarato. Estudos vibracionais experimentais e teóricos dos sais alcalinos do esquarato indicam que há um aumento da deslocalização eletrônica no anel do ânion com o aumento do volume do cátion **6**. Os pseudooxocarbonos derivados do íon esquarato são interessantes neste tipo de estudo devido às mudanças nas interações intermoleculares e na deslocalização eletrônica do anel devido à substituição dos átomos de oxigênio pelos grupos dicianometileno.

Este projeto tem por finalidade desenvolver a interação entre técnicas espectroscópicas (especialmente vibracionais) e de difração de raios X com o objetivo de associar os modos vibracionais (infravermelho e Raman) característicos do íon pseudooxocarbono com os diferentes tipos de interações intermoleculares que podem ser observadas no estado sólido.

Referências bibliográficas

1. L.F.C. de Oliveira, S.M. Mutarelli, N.S. Gonçalves, P.S. Santos, Química Nova (1992) 15, 55.
2. A. J. Fatiadi, J. Am. Chem. Soc. (1978) 100, 2586.
3. A. J. Fatiadi, J. Org. Chem. (1980) 45, 1338.
4. R. Diniz, L. R. V. De Sá, B. L. Rodrigues, M. I. Yoshida, N. L. Speziali, L. F. C. de Oliveira, J. Mol. Struct. (2008) 876, 1.
5. V. L. Himes, A. D. Mighell, C. R. Hubbard, A. J. Fatiadi, J. Res. Nat. Bureau Stand. (1980) 85, 87.
6. S. L. Georgopoulos, R. Diniz, M. I. Yoshida, N. L. Speziali, H. F. Dos Santos, G. M. A. Junqueira, L. F. C. de Oliveira, J. Mol. Struct., (2006), 794, 63.