



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: ESTUDOS DE DETERMINAÇÃO ESTRUTURAL E ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL DE COMPLEXOS METÁLICOS COM LIGANTES POLI-DENTADOS

Orientador: Renata Diniz

Bolsistas:

Maria Clara Ramalho Freitas (XVI PIBIC)

MÁrcia Cristina De Souza (XX BIC)

Participantes:

Resumo:

Estrutura Cristalina e Estudo Espectroscópico do Complexo de Transferência de Carga entre o Ácido o-sulfobenzóico (SBZ) e a Base Nitrogenada 4,4'-trimetileno dipiridina (BPP)

Na literatura são descritos inúmeros trabalhos envolvendo transferência de carga, o estudo deste pode revelar interessantes propriedades eletrônicas dos sólidos (1). Um caso especial de transferência de carga seria a transferência de próton entre um centro doador (D) e um centro receptor (A) (2). A transferência de próton pode ser resumida como uma reação ácido-base (3). Outro tema freqüentemente abordado refere-se às interações de hidrogênio. Esta interação pode ser classificada como forte, média ou fraca (2). A compreensão das interações de hidrogênio pode levar ao entendimento das propriedades físico-químicas (1) desses compostos supramoleculares. Neste trabalho foi sintetizado o complexo com transferência de próton, utilizando-se o ácido o-sulfobenzóico (SBZ) e o ligante flexível 4,4'-trimetileno bipiridina (BPP). Os resultados espectroscópicos sugerem a formação de um sistema com transferência de carga que pode ser confirmado pelo espectro vibracional que apresentou uma banda forte em 1621 cm^{-1} que foi tentativamente atribuída à deformação do NH. Outro indício da transferência de carga seria a ausência da banda em 1722 cm^{-1} tanto no infravermelho quanto no Raman, referente ao estiramento COOH, sugerindo a desprotonação total do SBZ. Estes dados estão em concordância com a estrutura cristalina obtida por difração de raios x de monocristal. Os resultados de difração de raios x revelam que o grupo espacial é $P2_1/n$, sendo o sistema monoclinico. A estrutura cristalina revela que a conformação do ligante flexível BPP seria do tipo TT uma vez que a distancia $d(N1-N2)$ é de 9,91 angstroms (4). O ânion SBZ-2 interage com o cátion H_2BPP+2 através de ligações de hidrogênio, sendo esta do tipo forte entre os átomos $N1-O2$ ($d(O-N) = 2,565(2)$ angstroms) e media entre os átomos $N2-O4$ ($d(O-N) = 2,771(2)$ angstroms). Estas interações formam um zig-zag estendendo-se paralelamente ao longo do eixo cristalográfico b. Verificou-se também a existência de interações de empacotamento π entre os anéis piridínicos pertencentes a planos adjacentes ($d(\text{centróide-centróide})=3,88$ angstroms). Sendo assim estas duas interações intermoleculares contribuem para a estabilização tridimensional do complexo formando um composto supramolecular.

1Reetz M. T., Höger S., Harms K. *Angew. Chem. Int.* 1994, 33, 181-183.

2Ei-faer M. Z., Ai-arfarj A.R. Hyssain M. S. J. *Coord. Chem.* 1991, 25, 283-289.

3Corrêa C. C., Diniz R., Chagas L. H., Rodrigues B. L., Yoshida M. I., Teles W. M., Machado F. C., de Oliveira L. F. *Poyiedron* 2007, 26, 989-995.

4L. Carlucci G. Giani, D.M. Yan, J. *Chem Soc., Dalton trans* 2002 121.