

Interação hóspede-hospedeiro entre o polímero de coordenação $[\text{Pd}_3(\mu\text{-N}_3)(\mu\text{-mPz})_5]_{11}$ e moléculas orgânicas aromáticas.

Adriano H. Akita (IC)*, Adelino V. G. Netto (PQ), Regina C. G. Frem (PQ) e Antonio E. Mauro (PQ)

e-mail: adrianoo@grad.iq.unesp.br

Instituto de Química de Araraquara, UNESP, Araraquara-SP.

Palavras Chave: Química hóspede-hospedeiro, polímeros de coordenação, paládio(II).

Introdução

Polímeros de coordenação contendo grandes cavidades ou canais capazes de alojar moléculas hóspedes têm atraído considerável interesse da comunidade científica devido aos seus potenciais usos em separações químicas, processos de troca iônica, catálise heterogênea, absorção de substâncias hóspedes, sensores químicos, armazenamento e transporte de gases, entre outros¹. Prosseguindo nosso interesse na área da química hóspede-hospedeiro, este trabalho envolve a investigação da química hóspede-hospedeiro envolvendo o polímero $[\text{Pd}_3(\mu\text{-N}_3)(\mu\text{-mPz})_5]_{11}$ e as moléculas aromáticas benzeno, clorobenzeno, bromobenzeno e tolueno, empregando o método de Job² via espectroscopia RMN-¹H.

Resultados e Discussão

O polímero foi sintetizado conforme método descrito na literatura³. A estequiometria do sistema hóspede-hospedeiro, quando formado, foi determinada através dos deslocamentos dos sinais de RMN-¹H em função da variação da razão molar entre as espécies participantes. Inicialmente, o espectro de RMN-¹H da substância hóspede na ausência do hospedeiro é obtido e seus sinais são registrados como $\delta_{\text{HÓSPEDE}}$. Em seguida, adiciona-se, em tubo de RMN, 0,5 mL de uma solução contendo 100 mg do polímero. São realizadas, então, adições de quantidades previamente estabelecidas da substância hóspede. Obtém-se um espectro de RMN após cada adição da substância hóspede e compara-se os deslocamentos químicos de seus sinais na presença do hospedeiro ($\delta_{\text{Polímero+Hóspede}}$) com o $\delta_{\text{HÓSPEDE}}$, calculando assim o $\Delta\delta$ ($\Delta\delta = \delta_{\text{Polímero+Hóspede}} - \delta_{\text{HÓSPEDE}}$). O deslocamento dos sinais para campo alto da substância hóspede na presença do hospedeiro (valores negativos de $\Delta\delta$) é indício de ocorrência de oclusão devido aos efeitos diamagnéticos provenientes das correntes dos anéis pirazólicos do hospedeiro. Na eventual ocorrência da oclusão, obtém-se dois conjuntos de pontos no gráfico $\Delta\delta$ vs. hóspede/hospedeiro. A intersecção entre as retas ajustadas para cada conjunto de pontos determina a estequiometria hóspede/hospedeiro.

Verificou-se que dentre as moléculas orgânicas aromáticas testadas, a oclusão no polímero ocorreu apenas para o benzeno. Conforme ilustrado na Figura 1, nota-se um deslocamento químico significativo para campo alto (em relação ao $\delta_{\text{HÓSPEDE}}$) dos sinais de RMN do benzeno na presença do hospedeiro ($\Delta\delta_{\text{MÁXIMO}} = -0,15$ ppm), sugerindo a ocorrência da oclusão do benzeno nas cavidades do polímero através de interações não-covalentes.

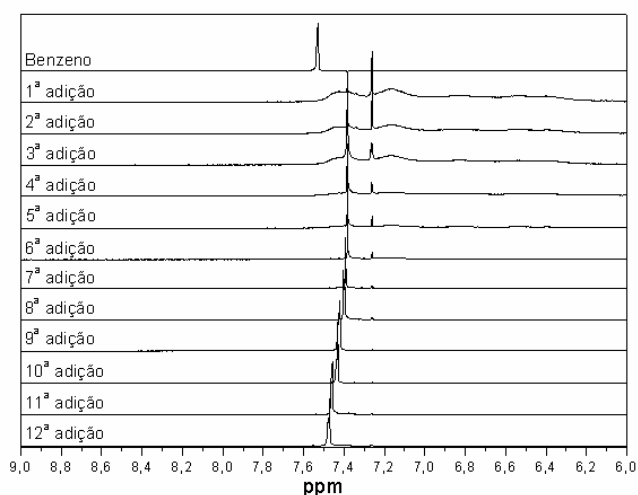


Figura 1. Deslocamentos químicos dos sinais de RMN-¹H do benzeno na presença do polímero.

Conclusões

Os resultados obtidos indicam que o polímero $[\text{Pd}_3(\mu\text{-N}_3)(\mu\text{-mPz})_5]_{11}$ apresenta alta seletividade no que diz respeito ao reconhecimento molecular de substâncias orgânicas aromáticas em solução, posto que somente a molécula de benzeno foi ocluída em suas cavidades, o que deve ser significativamente interessante do ponto de vista da tecnologia de novos sensores moleculares.

Agradecimentos

CNPq, Capes e FAPESP.

¹ Liu, S. Q.; Konaka, H.; Sowa, T. K.; Suenaga, Y.; Ito, H.; Ning, G. L.; Munakata, M., *Inorg. Chim. Acta* **2004**, 357, 3621.

² Job, P., *Ann. Chim. Paris* **1928**, 9, 113.

³ Netto, A.V.G.; Frem, R.C.G.; Mauro, A.E., *Polyhedron* **2005**, 24, 1086.