

Estudo por espectroscopia Raman das interações de líquidos iônicos imidazólicos com moléculas-sondas

Fabio Rodrigues^{1*} (PG), Paulo Sérgio Santos¹ (PQ)

*farod@iq.usp.br

Laboratório de Espectroscopia Molecular, Instituto de Química, Universidade de São Paulo, Rua Lineu Prestes, 748, Butantã, São Paulo, SP. CEP: 05508-900

Palavras Chave: líquido iônico, sonda, Raman.

Introdução

Líquidos iônicos são sais com baixo ponto de fusão sendo, em muitos casos, líquidos à temperatura ambiente. São sistemas de grande importância atual por seus diversos usos em importantes áreas da química. Seu principal atrativo vem de suas características mistas entre líquido e sólido, sendo um líquido, porém com organização a curta distância, com a presença de microdomínios, característica que o aproxima de um sólido¹. Ou seja, diferem da estrutura relativamente homogênea dos líquidos usuais. São, também, mais fáceis de trabalhar do que sais fundidos.

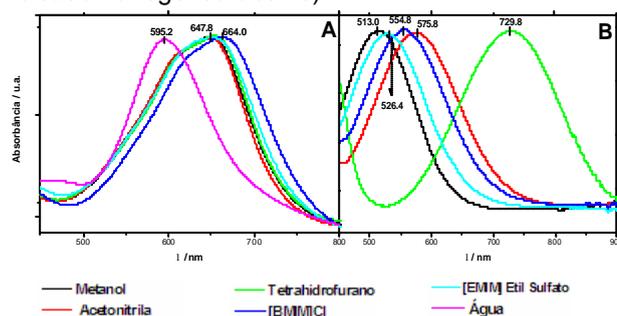
Apesar de sua importância, sua estrutura microscópica ainda não é bem compreendida¹. Neste contexto, este trabalho procura investigar, usando espectroscopia Raman e eletrônica, os microdomínios nos líquidos iônicos imidazólicos, usando moléculas sondas, que agem diretamente nesses sítios.

As respostas desejadas podem ser obtidas estudando uma série de compostos, com pequenas variações (como contra-íon e tamanho de cadeia) e observando as diferenças. Serão mostrados aqui os líquidos iônicos: cloreto de 1-butil,3-metil-imidazol ([BMIM]Cl) e 1-butil,3-metil-imidazol etil sulfato ([EMIM]ES) com os corantes verde de Janus e betaina de Reichardt (sondas), esta última com forte efeito solvatocrômico.

Resultados e Discussão

Um espectro UV-Vis dessas sondas em alguns solventes (figura 1) de interesse dá uma idéia do que pode ser estudado.

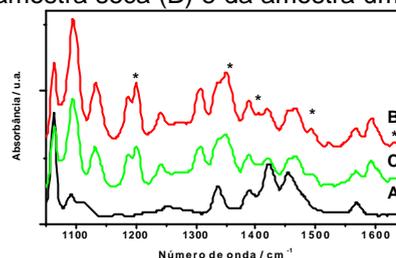
Figura 1. Espectros UV-Vis do verde de Janus (A) e da Betaina de Reichardt (B) em diversos solventes (indicado na legenda abaixo)



29ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

Entretanto, a escala de polaridade reflete a estrutura macroscópica do solvente, não levando em consideração os microdomínios existentes e, portanto, somente esta técnica não fornece informações suficientes. Usando espectroscopia Raman, pode-se estudar diretamente esses microambientes ligados à sonda. Dependendo da propriedade da sonda, ela terá uma interação com um sítio do solvente. Na figura 2, o espectro do mesmo corante (verde de Janus) é comparado em uma amostra completamente seca (vácuo a 10^{-3} torr) e na amostra úmida. Pequenas alterações, marcadas com um asterisco podem ser observadas, pois a água compete com a sonda nesses sítios.

Figura 2. Espectro Raman em laser de 1064 nm do líquido iônico EMIM ES puro (A), do líquido com o corante, amostra seca (B) e da amostra úmida (C).



Essa sensibilidade das sondas pelos domínios de líquido iônico pode ser muito intensificada pelo efeito Raman Ressonante, em que a excitação do laser ocorre no comprimento de onda de absorção eletrônica do corante, fazendo com que os picos do corante se intensifiquem muito, tornando qualquer alteração nas bandas facilmente perceptível.

Conclusões

A técnica de espectroscopia Raman é bem apropriada ao tipo de estudo proposto, podendo revelar resultados importantes para esses sistemas ainda não totalmente compreendidos. Entretanto, devido às amplas características dos sistemas estudados, ainda há muito a ser entendido, necessitando outras técnicas e outros tipos de estudo.

Agradecimentos

CNPq, FAPESP.

¹ Dupont, J. J. *Braz. Chem. Soc.* 2004, 15 (3), 341.

