

## Interação entre o ácido esvárico e bases nitrogenadas em complexos moleculares envolvendo a transferência de prótons.

Elgte Elmin B. De Paula<sup>1\*</sup> (IC), Maria Irene Yoshida<sup>2</sup> (PQ), Renata Diniz<sup>1</sup> (PQ), Luiz Fernando C. de Oliveira<sup>1</sup>(PQ) e Flávia C. Machado<sup>1</sup> (PQ).

e-mail: [elgteelmin@yahoo.com.br](mailto:elgteelmin@yahoo.com.br)

<sup>1</sup>Departamento de Química, ICE, Universidade Federal de Juiz de Fora, Campus Universitário Martelos, Juiz de Fora - MG, 36036-330.

<sup>2</sup>Departamento de Química, ICE, Universidade Federal de Minas Gerais, Campus Pampulha, Belo Horizonte-MG, 31270-901.

Palavras Chave: ácido esvárico, bases nitrogenadas e transferência de prótons.

### Introdução

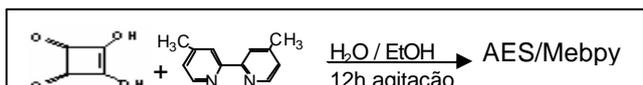
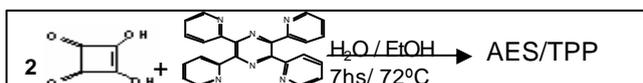
Na literatura são descritos diversos compostos do tipo doador-receptor de elétrons, nos quais ocorre transferência de prótons<sup>1</sup>. Nestes sistemas nenhuma ligação química é rompida ou formada durante o processo, sendo o próton transferido espontaneamente de um centro doador para um centro receptor por mecanismos que são quânticos em sua origem e fundamentais para vários processos físicos e químicos, bem como para ampliar o estudo de sistemas mais complexos. Estes sistemas vêm sendo relatados na literatura, envolvendo o ácido esvárico e diferentes bases nitrogenadas<sup>2</sup>.

No presente trabalho utilizaram-se dois ligantes nitrogenados derivados piridínicos, os quais são denominados: 2,3,5,6-tetraquis( $\alpha$ -piridil)pirazina, (TPP) e 4,4'-dimetil-2,2'-bipiridina (mebpy) além do ácido esvárico (AES), o qual é uma espécie plana, com alta simetria, elevado caráter ácido e apreciável grau de deslocalização eletrônica, o que lhe confere certas propriedades interessantes e singulares<sup>3</sup>.

Reportamos aqui, a investigação dos dados espectroscópicos bem como da estrutura cristalográfica dos complexos a fim de verificar as interações presentes nos mesmos.

### Resultados e Discussão

Os esquemas abaixo exibem os procedimentos sintéticos utilizados para a obtenção dos dois complexos de transferência de carga.



Os resultados espectroscópicos sugerem a formação de um sistema com transferência de carga, o que pode ser evidenciado por bandas largas em torno de 2440-2530  $\text{cm}^{-1}$  atribuídas à vibração (N-H...O). Alterações significativas podem ser observadas na região de 1670-1620  $\text{cm}^{-1}$ , relativas à deformação N-H e em torno de 1800 $\text{cm}^{-1}$ , referente  $\nu(\text{CO})$ .

Os resultados de análise térmica evidenciam uma elevada estabilidade térmica dos compostos. Os resultados citados estão em perfeito acordo com os

dados cristalográficos obtidos por difração de raios X de monocristal, os quais comprovaram a presença da interação (N-H...O), enfatizando a transferência de prótons e um sistema que consiste de infinitas cadeias conectadas por ligação de hidrogênio formando um composto supramolecular.

A TPP é um ligante bastante versátil, que no sistema AES/TPP, se conecta pelo modo bis-tridentado. A estrutura deste complexo revelou a formação de um dímero do ácido esvárico por ligação de hidrogênio (distância O...O de 2,470(2) Å) (conforme Fig.1) e a presença de uma unidade do ácido, totalmente desprotonado, que forma ligação de hidrogênio com o ligante TPP, cuja média das distâncias O...N é de 2,693(2) Å.

De modo análogo, no complexo AES/Mebpy houve a dimerização do ácido esvárico (Fig.2). As distâncias O...O e O...N das ligações de hidrogênio são respectivamente 2,474(2) e 2,736(2) Å.

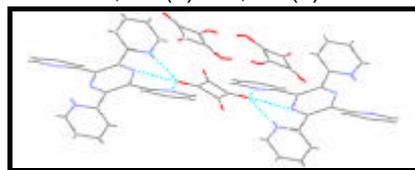


Fig. 1- Estrutura Cristalina determinada por difração de raios X de monocristal envolvendo TPP e AES.

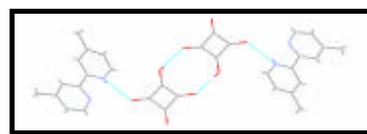


Fig. 2- Estrutura Cristalina do complexo Mebpy e AES.

### Conclusões

A determinação da estrutura cristalina dos complexos confirmou a presença de interações de hidrogênio, evidenciando que este tipo de ligação levou à formação de um composto supramolecular.

### Agradecimentos

<sup>1</sup>Mitani, T. *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* 1989, 171, 343..

<sup>2</sup>Farani, R. De A; Yoshida, M. I.; de Oliveira, L.F.C.; Machado, F. C; Rocha, W. R; Teles, W.M. 25<sup>o</sup> Reunião Anual da SBQ, 2002.

<sup>3</sup>De Oliveira, L. F. C. ; Mutarelli, S. R. ; Gonçalves, N. S. e Santos, P. S., *Química Nova* 15(1) (1992), 55,61.