

# 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).

Maria Clara R. Freitas<sup>1</sup> (IC), Renata Diniz<sup>1</sup> (PQ).

e-mail: claraframalha@hotmail.com

<sup>1</sup>Núcleo de espectroscopia e estrutura molecular (NEEM), Departamento de Química, ICE, Universidade Federal de Juiz de Fora, Campus Universitário Martelos, Juiz de Fora- MG 36036-330.

Palavras Chave: ácido *o*-sulfobenzóico, base nitrogenada, transferência de próton.

## Introdução

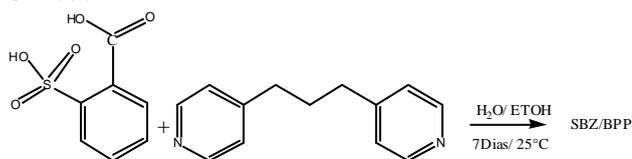
Na literatura são descritos inúmeros trabalhos envolvendo transferência de carga, o estudo deste pode revelar interessantes propriedades eletrônicas dos sólidos<sup>4</sup>. Um caso especial de transferência de carga seria a transferência de próton entre um centro doador (D) e um centro receptor (A)<sup>3</sup>. A transferência de próton pode ser resumida como uma reação ácido-base<sup>1</sup>.

Outro tema freqüentemente abordado refere-se às interações de hidrogênio. Esta interação pode ser classificada como forte, média ou fraca<sup>3</sup>. A compreensão das interações de hidrogênio pode levar ao entendimento das propriedades físico-químicas<sup>4</sup> 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).

## Resultados e Discussão

Síntese:

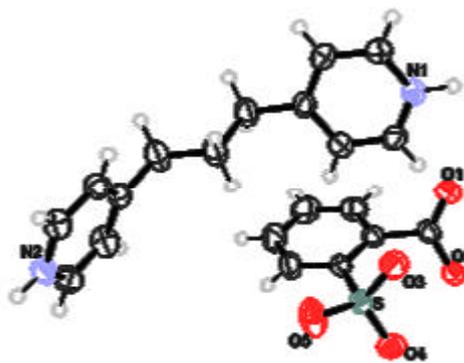


Os resultados espectroscópicos sugerem a formação de um sistema com transferência de carga que pode ser confirmado pelo espectro vibracional que apresentou uma banda forte em 1621 cm<sup>-1</sup> que foi tentativamente atribuída à deformação do NH. Outro indício da transferência de carga seria a ausência da banda em 1722 cm<sup>-1</sup> tanto no infravermelho quanto no Raman, referente ao estiramento  $\nu$ (COOH), sugerindo a desprotonação total do SBZ. Estes dados estão em concordância com a estrutura cristalina obtida por difração de raios x de monocristal (Figura 1).

Os resultados de difração de raios x revelam que o grupo espacial é P21/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 Å<sup>4</sup>.

31ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

O ânion SBZ<sup>2-</sup> interage com o cátion H<sub>2</sub>BPP<sup>+2</sup> através de ligações de hidrogênio, sendo esta do tipo forte entre os átomos N1-O2 (d(O-N) = 2,565(2) Å) e média entre os átomos N2-O4 (d(O-N) = 2,771(2) Å). Estas interações formam um zig-zag estendendo-se paralelamente ao longo do eixo cristalográfico *b*.



Figura

Verificou-se também a existência de interações de empacotamento  $\pi$  entre os anéis piridínicos pertencentes a planos adjacentes (d (centróide-centróide)=3,88 Å). Sendo assim estas duas interações intermoleculares contribuem para a estabilização tridimensional do complexo formando um composto supramolecular.

## Conclusões

Foi sintetizado um composto inédito, SBZ/BPP que teve confirmada a transferência de próton por espectroscopia e difração de raios x. A estrutura no estado sólido é estabilizada por interação de empacotamento  $\pi$  e ligações de hidrogênio.

## Agradecimentos

CNPq, FAPEMIG e LDRX (IF-UFF).

<sup>1</sup>Corrêa 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.

<sup>2</sup>L. Carlucci G. Giani, D.M. Yan, *J. Chem Soc., Dalton trans* **2002** 121.

<sup>3</sup>Ei-faer M. Z., Ai-arfarj A.R. Hyssain M. S. *J. Coord. Chem.***1991**, 25, 283-289.

<sup>4</sup>Reetz M. T., Höger S., Harms K. *Agew. Chem..Int.* **1994**, 33, 181-183.