

# Interpretação do espectro vibracional de líquidos iônicos imidazólicos

Fabio Rodrigues<sup>1\*</sup> (PG) e Paulo Sérgio Santos<sup>1</sup> (PQ)

<sup>1</sup>Laboratório de Espectroscopia Molecular – Instituto de Química – Universidade de São Paulo  
Av. Prof. Lineu Prestes, 748 – Butantã – São Paulo – SP CEP 05508-900

\*farod@iq.usp.br

Palavras Chave: Espectro Vibracional, Líquidos Iônicos, Imidazol.

## Introdução

Líquidos iônicos (ILs) são sais com baixo ponto de fusão, normalmente formados por cátions orgânicos grandes e ânions poucos coordenantes. Apresentam propriedades bastante distintas dos solventes orgânicos convencionais, e são mais simples de manipular que sais inorgânicos fundidos.

São solventes altamente estruturados; versáteis, pois dissolvem tanto compostos orgânicos como inorgânicos e podem ser moldados, alterando-se ânion e cadeias do cátion; não evaporam, importante no contexto de química verde etc [1].

Devido às suas propriedades, abriram-se diversas perspectivas promissoras para eles em diversas áreas da química, aumentando significativamente os trabalhos na área. Entretanto, devido ao caráter aplicado das pesquisas, estudos fundamentais sobre estes ainda são necessários.

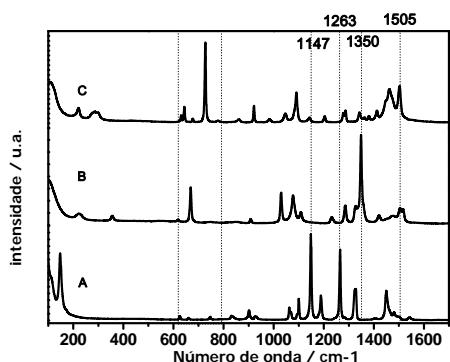
Dentre os grupos de ILs conhecidos, destacam-se os derivados do anel imidazol.

Este trabalho visa estudar a estrutura dos ILs imidazólicos a partir de seus precursores, por espectroscopia vibracional. Espectros registrados no equipamento FT-Raman Bruker FRS-100/s, com resolução de  $1\text{ cm}^{-1}$ .

## Resultados e Discussão

São mostrados na figura 1 os espectros Raman do imidazol e de seus derivados.

**Figura 1.** Espectro Raman: A) Imidazol (Im), B) 1-Metilimidazol (MIm) e C) 1,2-dimetilimidazol (DMIm).

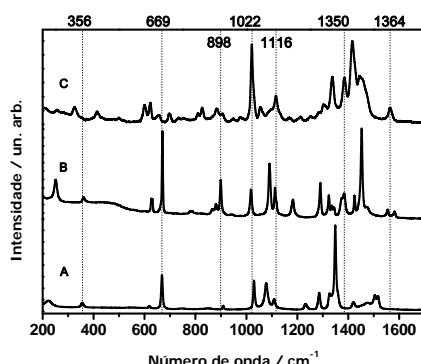


O pico em ca.  $1145\text{ cm}^{-1}$  da figura 1A e os picos entre  $600$  e  $750\text{ cm}^{-1}$  dos espectros 1B e 1C correspondem, respectivamente, aos modos N-H [2] e N-CH<sub>3</sub> [3]. O modo principal de respiro do anel, em

$1265\text{ cm}^{-1}$  para o Im [2], sofre mudança para  $1350\text{ cm}^{-1}$  para o MIm [3] e acima de  $1400\text{ cm}^{-1}$  para DMIm. O grupo –CH<sub>3</sub> é um doador de elétrons e aumenta a densidade eletrônica do anel.

No cátion (figura 2 B,C), os modos -NCH<sub>3</sub> aparecem quase inalterados em frequência (ex: ca.  $668$ ,  $1077$  e  $1110\text{ cm}^{-1}$ ) [3,4], enquanto os de respiro do anel sofrem deslocamento (ex: de  $1350\text{ cm}^{-1}$  na fig. 2A para  $1420\text{ cm}^{-1}$  na fig. 2C).

**Figura 2.** Espectro Raman: A) MIm, B) Cloreto de 1-metilimidazólio ([MIm]Cl) e C) Brometo de 1-butil-3-metilimidazólio ([BMIm]Br).



No trabalho, além destas bandas, são considerados também os espectros de bromoalcanos e de outros ILs (espectros não mostrados).

## Conclusões

O estudo do deslocamento das bandas Raman do líquido iônico e de seus precursores fornece informações sobre a densidade de carga no anel, o qual, indiretamente, está relacionado com os sítios de interações dessas moléculas e permite melhor a compreender suas interações intermoleculares.

Dessa maneira, é possível interpretar e entender os espectros vibracionais dos líquidos iônicos e o reflexo, no espectro, de alterações em sua estrutura.

## Agradecimentos

FAPESP e CNPq.

<sup>1</sup> Ionic liquids in Synthesis; Wassercheid, P., Welton, T., Eds.; Wiley-VCH: Weinheim, 2003.

<sup>2</sup> Cordes, M. e Walter, J.L. *Spectrochimica Acta*, **1968**, 24A, p.237;

<sup>3</sup> Carter, D.A. e Pemberton, J.E., *J. Raman Spectrosc.* **1997**, 28, p.939.

<sup>4</sup> Berg, R.W., Deetlefs, M., Seddon, K.R., Shim, I. e Thompson, J.M. *J. Phys. Chem. B* **2005**, 109, p. 19018.