

Formação de o-Ps em Complexo Cristalino de TPPO - Acetanilida

Fernando C. Oliveira^{1,2} (PG)*, José C. Machado¹ (PQ), Luana D. L. Guerra² (IC), Laiana R. Souza (IC)¹, Vivian S. L. Oliveira² (TC).

fernando.c.oliveira@gmail.com

¹Laboratório de Espectroscopia de Aniquilação de Pósitrons e Química de Materiais, DQ, ICEX – UFMG – BH, MG.

²Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais, CEFET-MG, campus VII, Timóteo – MG.

Palavras Chave: Positrônio, co-Cristais Moleculares, TPPO-ACTL.

Introdução

O estado ligado do pósitron (e^+) com um elétron (e^-) é denominado positrônio (Ps), para-positrônio (p-Ps), se os spins das duas partículas são anti-paralelos (um simpleto), ou orto-positrônio (o-Ps), se seus spins são paralelos (um tripleto) [1]. Os tempos de vida (τ) intrínsecos dessas espécies são 0,125 ns e 142 ns, respectivamente. Em um meio material, dependendo das propriedades físico-químicas do mesmo, a vida média do o-Ps (τ_3) é diminuído significativamente. O parâmetro relacionado à probabilidade de formação do o-Ps têm se mostrado bastante eficiente no estudo eletrônico de complexos de lantanídeos [2].

O objetivo central do presente trabalho foi o de estudar a formação do Ps, através da técnica de Espectroscopia de Vida Média de Pósitrons – EVMP, em complexos moleculares cristalinos constituídos por substâncias de caráter predominantemente moleculares, a saber: óxido de trifenilfosfina (TPPO) e a acetanilida (ACTL).

Resultados e Discussão

Os co-cristais foram obtidos através da dissolução dos precursores isolados em solvente comum (tolueno) seguido pelo processo de evaporação lenta do mesmo. Os co-cristais foram caracterizados por FTIR, HPLC e difração de raios X de monocristal (DRX).

A análise dos espectros de IV do TPPO, da ACTL e dos complexos revelou um deslocamento da banda de estiramento P=O (1190 cm^{-1}) para região de menor frequência (1183 cm^{-1}) o qual foi atribuído à formação da ligação de hidrogênio entre o TPPO e ACTL. Além do IV a DRX de monocristal confirmou a formação de ligação de Hidrogênio, Figura 1.

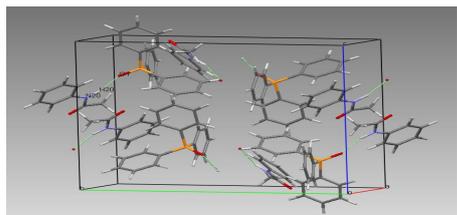


Figura 1. Representação Mercury 2.2 para o empacotamento cristalino.

O resumo dos resultados obtidos pela EVMP são apresentados nas Figuras 2 e 3. Como mostrado nas Figuras 2 e 3, observa-se um forte aumento no

parâmetro I_3 em função de $\chi_{ACTL}^{Exp.}$ até composição equimolar, seguido da diminuição na faixa de $\chi_{ACTL}^{Exp.} = 0,500$ a 1,00.

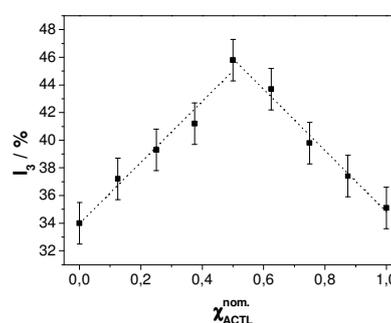


Figura – 2: I_3 em função fração molar de ACTL. Tanto o TPPO quanto a ACTL, isolados, são bons formadores de positrônio, $I_3 \approx 34\%$. Entretanto, a formação do complexo TPPO·ACTL (na proporção 1:1) leva a um aumento significativo no parâmetro I_3 .

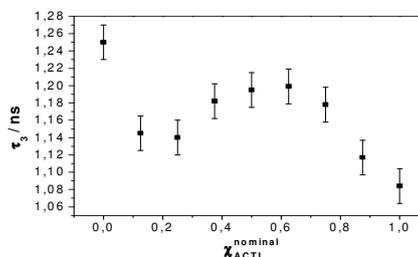


Figura – 3: τ_3 em função fração molar de ACTL. O comportamento do parâmetro τ_3 , que está correlacionado com o volume livre do meio, é corroborado com os dados de DRX.

Conclusões

Complexos moleculares cristalinos do tipo TPPO·ACTL foram preparados e caracterizados por FTIR, HPLC e DRX de monocristal. Os dados de EVMP sugerem uma forte dependência entre os parâmetros vida média e probabilidade de formação do o-Ps e a formação do co-cristais de TPPO·ACTL.

Agradecimentos

UFMG, CEFET-MG, CNPq, FAPEMIG

¹ A. E. Ruark, Phys. Rev. 68 (1943) 278

² Faustino, W. M., Sá, G. F., Malta, O.L., Magalhães W. F., Machado, J. C., Chemical Physics Letters, 452 (2008) 249.