

Formação de Positrônio em co-Cristais Moleculares: TPPO-TFNM

Fernando C. Oliveira^{1,2} (PG)*, José C. Machado¹ (PQ), Luana D. L. Guerra² (IC), Bárbara M. Bianchini² (TC), Rosemberg S. S. Silva² (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-TFNM.

Introdução

Um melhor entendimento do mecanismo envolvido na formação de Positrônio – Ps – (estado ligado entre um pósitron, e^+ , e um elétron, e^-) em sistemas moleculares é um problema em aberto, que tem recebido considerável atenção de físicos e químicos, teóricos e experimentais. Como a formação do positrônio em compostos moleculares depende de propriedades químicas e físicas do sistema, este problema envolve diferentes campos do conhecimento, incluindo química e ciências dos materiais¹.

Utilizando a espectroscopia de vida média de pósitron (EVMP), foram estudados complexos moleculares cristalinos. O objetivo central do presente trabalho reside numa possível correlação existente entre os parâmetros de aniquilação de pósitrons, mais especificamente a vida média do o-Ps (τ_3) e o parâmetro relacionado à probabilidade de sua formação (I_3 %), com a formação de complexos moleculares cristalinos obtidos entre uma base e um ácido de Lewis, a saber: óxido de trifenilfosfina (TPPO) e o trifenilmetanol (TFNM), respectivamente.

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 (DRX).

A análise dos espectros de IV do TPPO, do TFNM e do complexo TPPO-TFNM ($\chi = 0,500$) revelou um deslocamento da banda de estiramento P=O em 1183 cm^{-1} para região de menor frequência 1153 cm^{-1} e da banda de O-H em 3466 cm^{-1} para 3294 cm^{-1} os quais foram atribuído à formação da ligação de hidrogênio entre o TPPO e TFNM. As frações molares dos co-cristais preparados foram determinadas através da técnica de HPLC e os dados cristalográficos através da DRX.

O resumo dos resultados obtidos pela EVMP são apresentados nas Figuras 1 e 2. Como mostrado nas Figuras 1 e 2, observa-se um forte decréscimo nos parâmetros I_3 e τ_3 em função de $\chi_{TFNM}^{Exp.}$ até composição equimolar, seguido de aumento na faixa de $\chi_{TFNM}^{Exp.} = 0,500$ a 1,00.

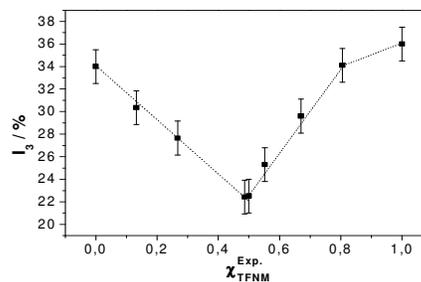


Figura 1. Parâmetro I_3 como função da fração molar de TFNM.

Tanto o TPPO quanto o TFNM, isolados, são bons formadores de positrônio, 34 e 36%, respectivamente. Entretanto, a formação do complexo TPPO-TFNM (na proporção 1:1) leva a uma diminuição significativa no parâmetro I_3 .

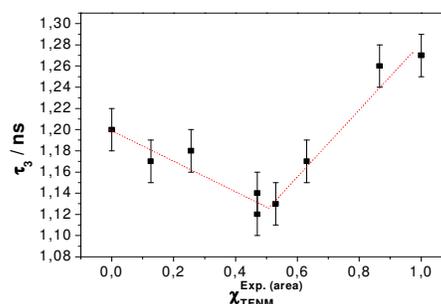


Figura 2. Parâmetro τ_3 como função da fração molar de TFNM.

O comportamento do parâmetro τ_3 , que está correlacionado com o volume livre do meio, é corroborado com os dados de DRX.

Conclusões

Os co-cristais foram obtidos e caracterizados por IV, HPLC e DRX. 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-TFNM.

Agradecimentos

UFMG, CEFET-MG, FAPEMIG, CNPq

¹ Faustino, W. M., Sá, G. F., Malta, O.L., Magalhães W. F., Machado, J. C., Chemical Physics Letters, 452 (2008) 249.