

Construção de triângulos supramoleculares de paládio e investigação em sistemas hóspede-hospedeiro

Jeniffer B. H. Lin¹ (IC)*, Tiago Fossa¹ (IC), Regina C.G. Frem¹ (PQ), Patrícia B. da Silva¹ (PG), Adelino V.G. Netto¹ (PQ), Antonio E. Mauro¹ (PQ), Patrícia Silva² (PG), Filipe A. A. Paz² (PQ), João Rocha² (PQ)

jen.shiryu@gmail.com

¹ Depto. de Química Geral e Inorgânica, Instituto de Química – Unesp, CEP 14801-970, Araraquara, SP, Brasil

² Depto. de Química, Universidade de Aveiro, CICECO, CEP 3810-193, Portugal

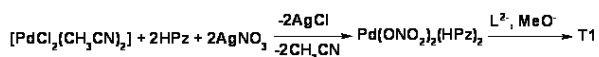
Palavras Chave: química supramolecular, paládio, sistemas hóspede-hospedeiro

Introdução

A Química Hóspede-Hospedeiro trata do estudo de complexos moleculares altamente estruturados, compostos de, no mínimo, um componente hóspede e um hospedeiro. O hospedeiro pode ser uma molécula ou íon capaz de acomodar em sua cavidade outras espécies, denominadas hóspedes. Embora os avanços recentes ainda permaneçam direcionados ao reconhecimento molecular por hospedeiros orgânicos, a busca pelos seus análogos inorgânicos tem se tornado uma área de crescente interesse [1]. Dentro deste contexto, apresentamos nesse trabalho a síntese, caracterização e investigação da propriedade hóspede-hospedeiro da metalosupramolécula $[\text{Pd}_6(\mu\text{-bimz})_3(\mu\text{-pz})_6]$ (**T1**) (bimz=2,2'-bis-4,5-dimetilimidazol; pz = pirazolato).

Resultados e Discussão

Os compostos foram preparados conforme esquema abaixo:



A coordenação do ligante imidazólico na forma L^2 foi evidenciada via espectroscopia vibracional no IV: (i) ausência da banda larga e intensa associada ao modo νNH ($3300\text{-}2400\text{ cm}^{-1}$); (ii) presença de duas bandas intensas em 1623 e 1386 cm^{-1} atribuídas ao modo νCN ; (iii) ausência dos modos de deformação no plano e fora do plano do grupo N-H; (iv) presença das bandas típicas dos modos vibracionais dos grupos metílicos em 2920 cm^{-1} ($\nu_{\text{as}}\text{CH}_3$) e 2856 cm^{-1} ($\nu_{\text{s}}\text{CH}_3$). Quanto à presença do ligante pirazólico, o modo exobidentado deste ligante foi diagnosticado pela ausência da banda νNH , presença da banda ϕ em 1487 cm^{-1} e aparecimento de apenas duas bandas γCH em 869 e 744 cm^{-1} .

O espectro de ^1H RMN do composto, juntamente com o esquema de numeração adotado, estão apresentados na Figura 1.

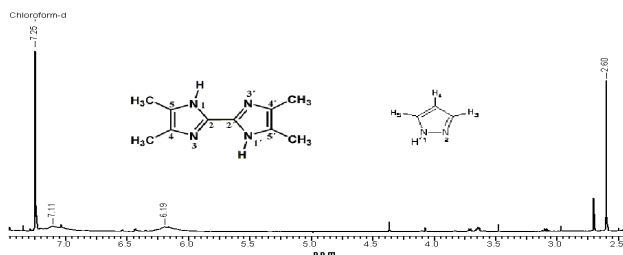


Figura 1. Espectro de ^1H RMN do composto $[\text{Pd}_6(\mu\text{-bimz})_3(\mu\text{-pz})_6]$ (**T1**).

Nesse espectro, observam-se sinais em $\delta 2,60$ (grupos CH_3 em C-4 e C-5), $\delta 6,19$ (H-4 Pz) e $\delta 7,11$ (H-3 e H-5 Pz), que também estão de acordo com as propostas de coordenação para os ligantes. O resultado da análise elementar também concorda com a fórmula proposta: obt. (calc.) %C = 31,5 (35,6); %H = 3,11 (3,39); %N = 20,1 (20,9). Uma das possibilidades estruturais para o composto considera a formação de uma supramolécula triangular, cujas arestas são constituídas pelos *tectons* lineares $\text{Pd}(\mu\text{-bimz})\text{Pd}$, enquanto que pontes de pirazolato fecham os vértices (ver Figura 2).

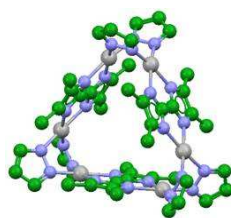


Figura 2. Proposta estrutural para o composto $[\text{Pd}_6(\mu\text{-bimz})_3(\mu\text{-pz})_6]$. Os círculos verdes, azuis e cinzas representam os átomos de carbono, nitrogênio e paládio, respectivamente.

Experimentos hóspede-hospedeiro revelaram oclusão da molécula CHCl_3 nas cavidades do composto, que foi também confirmado por Espectroscopia de Energia Dispersiva (EDS).

Conclusões

A metodologia utilizada proporcionou condições favoráveis para a auto-montagem de uma espécie cíclica, cujas cavidades podem confinar moléculas pequenas como convidados.

Agradecimentos

Às Pró-Reitorias de Pesquisa e PG da UNESP e ao CNPq pelo suporte financeiro.

J. Freudenreich, N. P. E. Barry, G. Süß-Fink, B. Therrien, Eur. J. Inorg. Chem., **2010**, 2400-2405.