PROSPECÇÃO PARA O DESENVOLVIMENTO DE UM NOVO MATERIAL MOLECULAR: OBTENÇÃO DE UM FRASCO MOLECULAR DISCRETO DE PALÁDIO(II)

SILVA, Cristiana da [1]
Doutora em Química Inorgânica
CAVANIA, Valéria da Silva[2]
Graduanda em Química
STEVANATO, Alessandra[3]
Doutora em Química Inorgânica
TREU FILHO, Oswaldo[4]
Doutor em Química Inorgânica
MAURO, Antonio Eduardo [5]
Doutor em Química Inorgânica
FREM, Regina C. G. [6]
Doutora em Química Inorgânica
GODOY NETTO, Adelino Vieira de[7]
Doutor em Química Inorgânica

RESUMO

A auto-montagem de sistemas supramoleculares discretos a partir de blocos de construção moleculares representa um tópico de interesse significativo no desenvolvimento de novos materiais moleculares. A partir da metodologia da auto-montagem de blocos de construção, é possível planejar e sintetizar uma variedade de compostos de coordenação supramoleculares, com um grande controle sobre seus formatos, tamanhos, propriedades físicas e dimensões das cavidades internas. Esses hospedeiros metalo-orgânicos apresentam potenciais aplicações como mediadores ("frascos moleculares") de um grande número de reações químicas, como por exemplo: reação de Diels-Alder, cicloadição, fotoquímica, catálise, fotodimerização; também pode ser aplicado como hospedeiro metalo-orgânico, reatores moleculares, entre outras. A partir da metodologia da auto-montagem de blocos de construção, é possível planejar e sintetizar uma variedade de compostos de coordenação supramoleculares, com um grande controle sobre seus formatos, tamanhos, propriedades físicas e dimensões das cavidades internas, conforme relatado na biblioteca molecular. Embora vários íons metálicos possam ser utilizados na obtenção de supramoleculas, os complexos de rutênio, paládio e platina têm sido mais utilizados devido à

[1] Universidade Federal da Grande Dourados (UFGD), Departamento de Química, Dourados – MS, cristiana_silva28@yahoo.com.br
[2] Universidade Federal da Grande Dourados (UFGD), Departamento de Química, Dourados – MS, valeriacavania585@gmail.com
[3] Universidade Tecnológica Federal do Paraná (UTFPR), Departamento Acadêmico de Química, Londrina – PR, stevanato@utfpr.edu.br
[4] Universidade Estadual Paulista (UNESP), Instituto de Química, Departamento de Química Geral e Inorgânica, Araraquara – SP, oswaldo.treu.filho@gmail.com
[5] Universidade Estadual Paulista (UNESP), Instituto de Química, Departamento de Química Geral e Inorgânica, Araraquara – SP, ae.mauro@unesp.br
[6] Universidade Estadual Paulista (UNESP), Instituto de Química, Departamento de Química Geral e Inorgânica, Araraquara – SP, rcgfrem@gmail.com
[7] Universidade Estadual Paulista (UNESP), Instituto de Química, Departamento de Química Geral e Inorgânica, Araraquara – SP, adelino.netto@unesp.br

sua estabilidade. Sendo assim, o objetivo deste trabalho foi sintetizar um novo frasco molecular com cavidade para futuramente a investigação como mediador de reações. A espécie $[Pd_6(\mu\text{-bpym})_3(\mu\text{-Pz})_6]$ foi formada a partir da reação de auto-montagem entre o bloco de construção linear $[Pd_2(\mu\text{-bpym})Cl_4]$ (bpym = 2,2'-bipirimidina) e o ânion pirazolato (Pz). Este frasco molecular foi caracterizado pelas técnicas de análise elementar, espectroscopia vibracional no IV, DFT, RMN e espectrometria de massas (ESI-MS). A partir da análise dos dados espectroscópicos e dos resultados provenientes dos cálculos quânticos *ab initio* baseados na teoria do funcional de densidade (DFT), foi possível propor estrutura hexanuclear com forma de triângulo equilátero do tipo $[Pd_6(\mu\text{-bpm})_3(\mu\text{-Pz})_6]Cl_6$ O ambiente dos íons de Pd é levemente distorcida do arranjo quadrado planar, com dois átomos de nitrogênio de bpym e dois átomos de nitrogênio do ligante pirazolato. Nota-se que a cavidade apresenta um diâmetro de aproximadamente 9,13 Å, e as arestas do triângulo são 9,230 Å e sua altura de 11,47 Å. Cabe mencionar ainda que há uma pequena distorção do ligante bpym para se coordenar simultaneamente a dois átomos de Pd(II). Essa tensão pode estar relacionada à instabilidade em solução apresentada pelo frasco molecular. Pois em solução de DMSO-d_6 ou MeOH, o frasco molecular sofreu decomposição devido ao aparecimento de sinais de RMN e na fragmentação da espectrometria de massas. Cabe mencionar que no estado sólido, ocorre a formação do frasco molecular com cavidade. Assim a possível existência de uma cavidade na sua estrutura, a torna uma candidata em potencial para investigação de suas propriedades.

Palavras-chave: Auto-montagem; Frasco molecular; Química supramolecular