

Ácido pícrico: Busca por novas formas cristalinas e análise de suas interações moleculares

MIKE CERQUEIRA MARTINS TELMO (Autor), Rodrigo de Souza Corrêa (Orientador)

Ácido pícrico (2,4,6-trinitrofenol) compõe umas das classes de moléculas polinitrofenólicas aromáticas. Devido à grande retirada de densidade eletrônica do anel aromático, pelos grupos nitro, a molécula tem alta capacidade de doar o o átomo de hidrogênio ligado ao grupo OH, portanto, classificada como ácido. O presente trabalho buscou a obtenção de novas formas cristalinas, tendo o ácido pícrico como doador de prótons e formando ligações de hidrogênio. Foram obtidas duas sínteses com resultados satisfatórios: uma contendo 2,2'-dipiridilcetona (1) e outra contendo 4,4'-di-terc-butil-2,2'-dipiridil (2) atuando como receptores de prótons. Em ambas as sínteses, os monocristais foram obtidos a partir de uma mistura na proporção molar de 1:1, inicialmente solubilizada em eppendorf e depois transferida para um béquer. A técnica utilizada na cristalização foi a de evaporação lenta de solvente em ambos os casos, com o auxílio da lupa para visualização da formação de cristais. Analisando os dados de infravermelho para (1) observa-se que na região de 1697 cm^{-1} a presença do grupo C=O confirma a molécula de 2,2'-dipiridilcetona na forma cristalina. No espectro de (2) pode-se confirmar a presença do grupo terc-butil pela presença dos estiramentos assimétricos e simétricos do grupo CH₃, na região de 2900 e 2800 cm^{-1} , respectivamente. Ambas apresentam o íon picrato, onde o grupo nitro (-NO₂) apresenta bandas intensas referentes aos estiramentos simétricos e assimétricos que ocorrem na região de 1300-1350 e 1500-1550 cm^{-1} . Foi confirmada a obtenção de duas novas formas cristalinas por meio de difração de raios X por monocristal. Em ambas formas houve a transferência do H⁺ para o nitrogênio N-heterocíclico, comprovando a formação de sais. Vale ressaltar que obtivemos resultados conclusivos que nos possibilitaram maior entendimento das interações intramoleculares na formação de sais, cocrystalais e outros sistemas multicomponentes. Agradecimentos ao apoio financeiro do PIP-UFOP.

Instituição de Ensino: Universidade Federal de Ouro Preto