

## Interações inter e intramoleculares em um novo polímero luminescente com derivados de glicina.

Ercules E. S. Teotonio<sup>1,7</sup> (PQ), Gerson M. Fett<sup>2</sup> (PG), Hermi F. Brito<sup>2</sup>(PQ), Antônio C. Trindade<sup>2</sup> (PG), Maria Cláudia F. C. Felinto<sup>3</sup> (PQ). **E-mail:ercules@catalao.ufg.br.**

<sup>1</sup> Departamento de Química - Campus Avançado de Catalão - Universidade Federal de Goiás-Catalão-GO, <sup>2</sup>Instituto de Química-Universidade de São Paulo-SP, <sup>3</sup>Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares-São Paulo-SP

Palavras Chave: *térbio, intermolecular, intramolecular, polímero, glicina .*

### Introdução

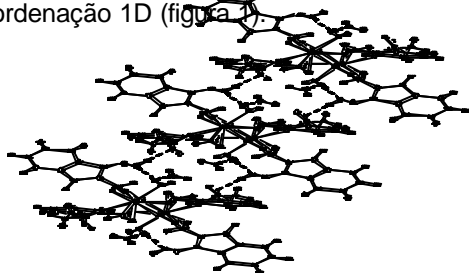
Nos compostos de íons metálicos os arranjos moleculares não são governados unicamente pelos modos de coordenação dos ligantes aos íons metálicos, mas também por várias interações inter e intra-moleculares devido às características estruturais dos ligantes escolhidos. Nesse contexto, as ligações de hidrogênio e interações  $\pi$ - $\pi$  são exploradas para a obtenção de superestruturas com novas propriedades no campo da engenharia de cristais inorgânicos, optoeletrônica, magnetismo e catálises. Neste trabalho investigamos as interações inter e intramoleculares de um novo e incomum composto do íon  $Tb^{3+}$  com os ligantes N-phthaloilglicina (Phthgly) e N-(2-carboxibenzoil)glicina (CBgly).

### Resultados e Discussão

O composto de  $Tb^{3+}$  foi sintetizado através da adição da solução aquosa de  $TbCl_3 \cdot 6H_2O$  (0.219 g, 1 mmol) à solução aquosa contendo uma mistura equimolar dos ligantes phthgly e CBgly. A solução resultante foi deixada em repouso por duas semanas originando cristais incolores (rendimento ~ 85%). Os dados de análise elemental experimental (calculados) para o composto são (em %): Tb, 23,64 (23,57); C, 33,53 (33,62); H, 3,20 (3,44); N, 4,14 (4,15).

Os dados da estrutura cristalina do complexo estão resumidos a seguir: Fórmula:  $C_{20}H_{23}N_2O_{13}Tb$ ; sistema cristalino, triclinico; grupo espacial,  $P_{-1}$ ; a = 9,079 Å; b = 10,186 Å; c = 14,673 Å;  $\alpha$  = 109.15 °;  $\beta$  = 94.39 °;  $\gamma$  = 106.36°; V = 1208,4 Å<sup>3</sup> e Z = 2.

O complexo de  $Tb^{3+}$  cristaliza como um polímero de coordenação 1D (figura 1).

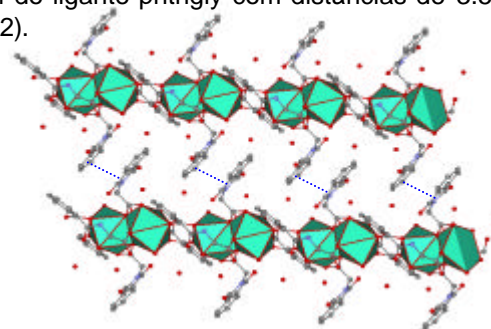


**Figure 1.** ilustração das ligações de hidrogênio intermoleculares.

As cadeias poliméricas são mantidas juntas por ligações de hidrogênio intermoleculares dos tipos:  $H-O-H_{(coord.)} \cdots O=H_{2(hidrata\c{a}o)}$  e  $C=O_{(phthgly)} \cdots O=H_{2(hidrata\c{a}o)}$  (Figura 1). Essas ligações de hidrogênio formam longas cadeias 2D supramoleculares.

As principais ligações de hidrogênio intramoleculares envolvem os grupos carbonilas não-coordenados do ligante phthgly e o hidrogênio amídico do ligante CBgly e, os grupos carbonila e carboxilato não-coordenados do ligante CBgly com as moléculas de água coordenadas ao íon  $Tb^{3+}$ .

Outra característica estrutural do composto é a formação de interações  $\pi$ - $\pi$  fracas entre os resíduos phtaloyl do ligante phthgly com distâncias de 3.566 Å (figura 2).



**Figure 2.** Estrutura polidradal do complexo  $[Tb(PHTHGLY)(CBGLY)(H_2O)_2](H_2O)_3]_{\infty}$  apresentando as interações  $\pi$ - $\pi$ .

O composto polimérico de  $Tb^{3+}$  exibe alta intensidade fotoluminescente, apresentando espectro de emissão com bandas finas características das transições  $^5D_4 \rightarrow ^7F_J$  (J = 0, 1, 2, 3, 4, 5 e 6), sugerindo um processo de transferência de energia intramolecular ligante-íon  $Tb^{3+}$  eficiente.

### Conclusões

O composto de  $Tb^{3+}$  exibe várias ligações de hidrogênio e interações  $\pi$ - $\pi$  fracas. Além disso, as propriedades luminescentes tornam o composto potencialmente aplicável na produção de DMCL.

### Agradecimentos

CNPq, FAPESP, RENAMI and IMMC pelo suporte financeiro.

<sup>1</sup> Baroah, N.; Karmakar, A.; Sarma, R. J.; Baruah, J. B. *Inorg. Chem. Comm.* **2006** *9* 1251.