

# ESTUDO DA FORMAÇÃO DE POSITRÔNIO EM CO-CRISTAIS MOLECULARES: ÓXIDO DE TRIFENILFOSFINA/ TRIFENILMETANOL

Bárbara Marques BIANCHINI (CEFET MG); Fernando Castro OLIVEIRA (CEFET MG); Vívian Scarlleth Lopes OLIVEIRA (CEFET MG); Luana Dias Lacerda GUERRA (UnilesteMG)

**Objetivo:** Estudar a formação do Positrônio (Ps), através da técnica de Espectroscopia de Vida Média de Pósitrons – EVMP, em co-cristais constituídos por substâncias de caráter predominantemente molecular, contendo grupos altamente eletrofílicos conjugados com elétrons pi: o Óxido de Trifenilfosfina (TPPO) e o Trifenilmetanol (TFNM). **Metodologia:** Os cristais dos compostos isolados foram preparados pela dissolução dos mesmos em solventes apropriados e submetidos à evaporação lenta. Estes cristais foram retirados da solução antes que o solvente secasse e posteriormente liofilizados.

Para os complexos moleculares foram preparados sistemas com as seguintes frações molares em termos do substrato: 0,125, 0,250, 0,375, 0,500, 0,625, 0,750 e 0,875.

Os co-cristais formados foram submetidos à análise de Espectroscopia na região do Infravermelho com Transformada de Fourier (FTIR). Esta análise forneceu informações quanto à composição dos compostos isolados e evidências relevantes quanto às interações intermoleculares entre os componentes dos sistemas que foram estudados. **Resultados:** A análise dos espectros de IV do TPPO e do complexo TPPO-TFNM ( $X = 0,500$ ) revelou um deslocamento da banda de estiramento P=O ( $1183 \text{ cm}^{-1}$ ) para região de menor frequência ( $1153 \text{ cm}^{-1}$ ), o qual foi atribuído à formação da ligação de hidrogênio entre o TPPO e TFNM.

Ao analisar os gráficos, observou-se que o parâmetro I3 diminui com o aumento da concentração do TFNM até a  $X = 0,500$  e este voltou a aumentar até o TFNM puro, sugerindo, igualmente, aumento da concentração de moléculas participantes da ligação de hidrogênio entre o TPPO e o TFNM.

A quebra da conjugação no TPPO pela ligação de hidrogênio com o TFNM levou a uma diminuição significativa de I3 de 34% no TPPO puro para 22% na solução sólida  $X= 0,500$ .

**Conclusão:** Grupos eletrofílicos conjugados com elétrons pi são “trapeadores” de pósitrons e inibidores de positrônio. A quebra desta conjugação no TPPO/TFNM pela ligação de hidrogênio gera uma diminuição significativa de I3.

Estudos de fotoluminescência tornam-se necessários para uma avaliação mais sólida de possíveis processos que afetam a interação pósitron-matéria neste sistema.

**Palavras-chave:** Tppo-tfnm. Co-cristais . Positrônio.

**Agências de fomento:** CNPq, FAPEMIG