

# ESTUDO DA FORMAÇÃO DE POSITRÔNIO EM SOLUÇÕES SÓLIDAS MOLECULARES: ÓXIDO DE TRIFENILFOSFINA - ACETANILIDA

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

Objetivo: Estudar a formação do Ps, através da técnica de Espectroscopia de Vida Média de Pósitrons – EVMP, em soluções sólidas (SS) e misturas mecânicas (MM) constituídas por substâncias de caráter predominantemente molecular, contendo grupos altamente eletrofílicos conjugados com elétrons  $\pi$ ; o Óxido de Trifenilfosfina (TPPO) e a Acetanilida (ACTL). Metodologia: Os cristais dos compostos isolados foram preparados pela dissolução dos mesmos em solventes apropriados e submetidos à evaporação lenta; os cristais formados foram retirados da solução antes que o solvente secasse e foram secos em liofilizador.

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.

Foram submetidas análise de Espectroscopia na região do Infravermelho com Transformada de Fourier (FTIR): Forneceu informações quanto à composição dos compostos isolados. Além de fornecer evidências bastante relevantes quanto às interações intermoleculares entre os componentes dos sistemas que foram estudados. Resultados: A análise dos espectros de IV do TPPO e de sua SS ( $\chi = 0,500$ ) revelou um deslocamento da banda de estiramento P=O (1190  $\text{cm}^{-1}$ ) para região de menor frequência (1183  $\text{cm}^{-1}$ ) o qual foi atribuído à formação da ligação de hidrogênio entre o TPPO e ACTL. O parâmetro I<sub>3</sub> aumenta com o aumento da concentração da ACTL, sugerindo, igualmente, aumento da concentração de moléculas participantes da ligação de hidrogênio entre o TPPO e a ACTL. Esta observação foi atribuída à quebra da conjugação entre os elétrons  $\pi$  dos grupos fenil os da fosforila no TPPO. O sistema conjugado, no TPPO, por efeito mesomérico deslocaliza a nuvem eletrônica  $\pi$  e, portanto, confere ao TPPO certo caráter “trapeador” de  $e^+$  o que inibe parcialmente a formação do Ps. Ao formar a ligação de hidrogênio com a ACTL, a conjugação no TPPO é quebrada e, portanto, a nuvem eletrônica  $\pi$  se localiza em sítios bem definidos o que favorece a interação do  $e^+$  com  $e^-$  e, conseqüentemente, o aumento na formação do Ps. Para as MM o parâmetro I<sub>3</sub> apenas segue a lei da aditividade. Conclusão: Grupos fortemente eletrofílicos (C=O, P=O) conjugados com elétrons  $\pi$  são bons “trapeadores” de pósitrons e inibidores da formação de Ps. A quebra desta conjugação no TPPO pela ligação de hidrogênio com a ACTL gera aumento significativo de I<sub>3</sub>.

Palavras-chave: Tppo-actl. Soluções sólidas. Positrônio.

Agências de fomento: CNPq, FAPEMIG