

# ESTUDO DO COMPORTAMENTO DOS MONÔMEROS PIRRÓLICOS (SUBSTITUÍDOS) EM CONDIÇÕES AMBIENTE

*Erika Peterson Gonçalves, Liu Yao Cho\**

Grupo de Química Orgânica - Instituto de Pesquisa e Desenvolvimento - UniVap  
Av. Shishima Hifumi 2911, Urbanova, 12244-000, São José dos Campos – SP  
\*e-mail: liu@univap.br

**Palavras-chave:** pirrol, espectroscopia de infravermelho, estabilidade química, polimerização  
**Área do Conhecimento:** Ciências Exatas e da Terra

**Resumo:** Foi estudado o comportamento de derivados pirrólicos por espectroscopia no infravermelho, em condições ambientes e verificou-se que o 3-bromo-1-(N-pirrol)-propila é muito instável em relação ao 3-hidroxi-1-(N-pirrol)-propila.

## **Introdução:**

O estudo de moléculas pirrólicas é interessante e pode originar polímeros (plásticos) com numerosas aplicações. Algumas delas são utilizadas para transformações químicas, proteção contra corrosão, materiais de recobrimento de superfícies de aeronaves anti-radar, baterias recarregáveis de baixo peso, sensores químicos, diodos de emissão de luz, materiais antiestáticas, biomedicina e outros. A simples modificação do pirrol com grupos ligados, seja pelo átomo de nitrogênio ou carbono, pode alterar as propriedades físicas e químicas de um desejado material.

Monômeros pirrólicos substituídos têm mostrado diferentes comportamentos de estabilidade quando expostos as condições ambientes. Assim, o conhecimento dos mecanismos que levam a sua estabilidade é importante para compreender uma posterior polimerização e aplicação.

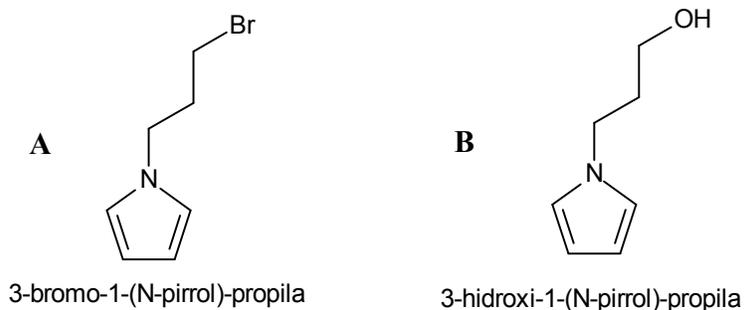
Para estimarmos a estabilidade dos monômeros pirrólicos substituídos sintetizados pelo nosso grupo de pesquisa, foi proposto um estudo por espectroscopia no infravermelho.

Essa técnica de caracterização é utilizada para identificar grupos funcionais e

estrutura de moléculas, baseia-se no movimento contínuo das moléculas, que quando sujeitas a radiação infravermelha alteram seu estado de excitação, absorvendo a radiação correspondente à diferença de energia entre o estado inicial e o estado excitado. Como não é possível uma molécula vibrar de qualquer modo, mas apenas de alguns modos, a absorção da radiação ocorre apenas para determinados valores da energia, valores estes que são característicos das moléculas. Assim, através da comparação dos valores de energia da radiação infravermelha para os quais há absorção, é possível identificar as moléculas ou os tipos de moléculas presentes.

Quando ocorre a degradação do material, conseqüentemente ocorre a mudança das moléculas presentes nele, ocasionando um deslocamento dos picos no espectro de infravermelho se comparados ao produto não degradado.

Deste modo, nesse trabalho foi realizado um estudo de acompanhamento por espectroscopia no infravermelho do 3-bromo-1-(N-pirrol)-propila (A) e do 3-hidroxi-1-(N-pirrol)-propila (B) para verificar as suas estabilidades em condições ambientes.



**Figura 1.** Compostos analisados por espectroscopia de infravermelho: (A) 3-bromo-1-(N-pirrol)-propila e (B) 3-hidroxi-1-(N-pirrol)-propila.

### Metodologia e Resultados:

Os monômeros pirrólicos substituídos foram sintetizados como descrito em trabalhos anteriores.<sup>1, 2</sup> Para a realização do estudo foi preparada uma amostra contendo um filme fino de cada composto em uma placa de NaCl, presa a uma porta amostras. As varreduras de infravermelho (FT-IR) foram realizadas em um Perkin Elmer FT-IR Spectrometer, mod. SPECTRUM 2000.

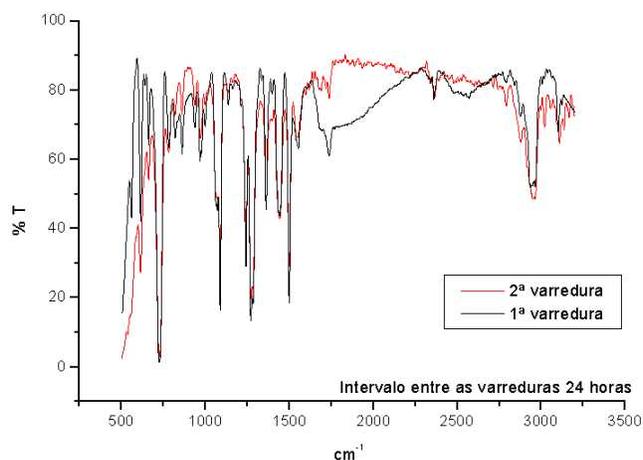
A fim de minimizar alguns problemas de degradação, as amostras desses compostos são guardadas e protegidas da iluminação ambiente, em baixa temperatura e previamente saturadas com nitrogênio seco.

Foram realizados 6 varreduras, com intervalo de 24 horas, aproximadamente, entre elas. Os resultados apontaram que da primeira varredura para a segunda não houve mudança do composto analisado. As amostras foram mantidas em um dessecador

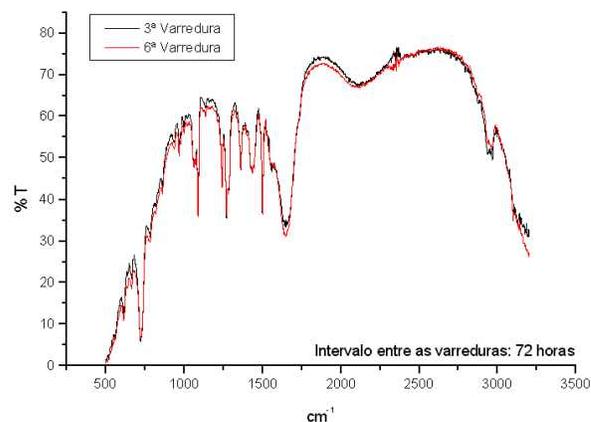
para evitar o contato com a umidade do ambiente, porém mantendo contato com luz, temperatura e oxigênio do ambiente.

A partir do terceiro dia de análise observou-se um pequeno deslocamento dos sinais e o aparecimento de um pico entre  $1500-1750\text{cm}^{-1}$  (C=C) para a amostra (A), o que caracteriza o início da alteração do material inicial. Provavelmente ocorre a polimerização do grupo pirrólico. Após este tempo não se observou mais mudança no espectro, isso pode ser observado na figura 3, que mostra a sobreposição da terceira e última análise realizada.

Para o composto (B), apresentado na figura 4 não se observou nenhuma mudança no espectro durante o mesmo período de análise e nas mesmas condições. O que comprova a maior estabilidade dos compostos pirrólicos ligados à hidroxila se comparados aos pirrólicos halogenados.



**Figura 2.** Espectros de FT-IR do composto (A), realizados com um intervalo de 24 horas.



**Figura 3.** Espectros de FT-IR do composto (A), Terceira e sexta análise realizadas com um intervalo de 72 horas.

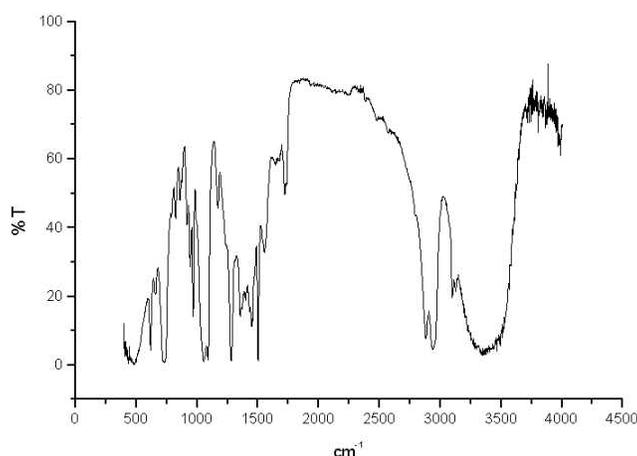


Figura 4. Espectros de FT-IR do composto (B), não apresentou modificações durante o período de análise.

## Conclusão

Os grupos contendo átomos de halogênio são normalmente mais instáveis.<sup>3</sup> Os espectros mostram que se degradam rapidamente em condições ambientes. A presença do átomo de Br está tornando a molécula mais reativa e isto não é observado quando o grupo hidroxila está presente. Este último demonstra ser extremamente estável.

Devido a essa característica evidenciada nesse estudo pode-se concluir que as sínteses que utilizam o composto (A) são mais difíceis de serem executadas devido ao baixo rendimento das reações (perde-se muito devido a reatividade) e requerem condições reacionais mais brandas, em contra partida, o composto (B) devido a sua estabilidade, pode ser aplicado em síntese química ou eletroquimicamente para modificar superfícies metálicas por polimerização.

## Agradecimentos

Os autores agradecem o suporte financeiro da FAPESP.

## Referências Bibliográficas

1- Gonçalves, E.P.; Lima, T.C.; Liu, A.S.; Pelisson, M.M.M.; Beltrame Jr M. e Cho, L.Y. *Síntese de um Ligante quiral pirrólico usado na eletrocatalise enantiosseletiva*, 24<sup>a</sup> Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química, 2001, Poços de Caldas, QO-024.

2- Gonçalves, E.P.; Cho, L.Y.; Liu, A.S.; Pelisson, M.M.M. e Beltrame Jr M. *Rota Sintética alternativa para o 4,5 - pineno-2,2'-bipiridina substituído utilizado na eletrocatalise assimétrica*, 26<sup>a</sup> Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química, 2003, Poços de Caldas, QO-076.

3- Pelisson, M.M.M. *Mecanismo de Reações Orgânicas*, Editora Poliedro, São José dos Campos, 2004.