

GÉIS POLIMÉRICOS COMPATÍVEIS COM SOLVENTES ORGÂNICOS E LÍQUIDOS IÔNICOS PARA MEDIDAS DE PARÂMETROS ANISOTRÓPICOS EM RMN.

*Daiane S. Carvalho¹, Higor D. F. De Melo¹, Fernando Hallwass¹ Armando Navarro-Vázquez¹

¹Depto. de Química Fundamental, Universidade Federal de Pernambuco, Brasil
*daiane.souza@ufpe.br

Palavras-chave: géis poliméricos, RDC, determinação estrutural

O desenvolvimento de meios de alinhamentos para a determinação da estrutura molecular utilizando parâmetros anisotrópicos de Ressonância Magnética Nuclear (RMN) vem crescendo nos últimos anos. Dentre estes, os géis poliméricos compatíveis com solventes orgânicos foram essenciais para o avanço da área. Géis com compressão reversível baseados em PMMA [2] ou poliacrilonitrila [3] facilitaram as medidas de RDCs e RCSAs. Neste trabalho, reportamos a preparação de géis de *N,N*-dimetilacrilamida/acrilonitrila (DMMA/AN) em diferentes concentrações, com compressão reversível e compatível com acetonitrila e líquidos iônicos. Os géis de DMMA/AN foram polimerizados via polimerização radicalar com frações 50:50 v/v e 75:25 v/v dos monômeros e 0,5% molar do reticulante EGDA. O processo de síntese e preparação dos géis foi descrito por Carvalho e colaboradores [3]. O gel 50:50 v/v foi lavado em acetonitrila e inserido em um tubo de RMN de 5 mm com 15 mg de α -santonina, e posteriormente dissolvido em acetonitrila- d_3 . Foram realizados experimentos de RMN de ^1H , ^2H e $g\text{HSQC}$ acoplado em F1 em um espectrômetro de 600 MHz, para o gel relaxado e comprimido. Avaliamos o grau de alinhamento através do experimento de ^2H . Quando o gel é comprimido o sinal da acetonitrila- d_3 desdobra-se em um duplete de 15 Hz. Foi possível ainda medir dez valores de RDCs para a molécula teste que variaram de -22 a 6 Hz. O intumescimento destes copolímeros foi avaliado em três líquidos iônicos distintos: Tetrafluorborato de 1-butil-3-metilimidazólio (BMI.BF₄⁻), Bis(trifluorometilsulfonil) imida de 1-butil-3-metilimidazólio (BMI.NTF₂) e Hexafluorofosfato de 1-butil-3-metilimidazólio (BMI.PF₆⁻). Após dois dias, observou-se que o gel 75:25 v/v apresentou um grau de intumescimento importante com BMI.NTF₂. Mais estudos deste sistema de intumescimento serão realizados a fim de avaliar suas propriedades mecânicas e sua aplicação como meio orientador.

Referências

- [1] C. Gayathri, N. V. Tsarevsky, R. R. Gil. Chem. Eur. J. 2010, 16, 3622.
- [2] D. S. Carvalho, D. G. B Da Silva, F. Hallwass, A. Navarro-Vázquez. J. Magn. Reson. 2019, 302, 21.

FACEPE (IBPG-0611-3.03/19 e IBPG-0485-3.03/19), CAPES, CNPq (426216/2018-0 e 311683/2019-3)