

278

ESTUDO DAS INTERAÇÕES DOS COMPLEXOS DE CALIXARENOS COM AMINAS. *Creusa Iara Ferreira, Eduardo Ernesto Castellano, Francine Furtado Nachtigall (orient.) (UFRGS).*

Calixarenos apresentam uma estrutura adequada para interagir com moléculas orgânicas e íons com uma cavidade hidrofóbica rica em elétrons e uma região polar ácida. Assim, eles interagem com aminas por transferência de prótons e formam complexos com estequiometria variável em que os íons amônio podem se localizar dentro ou fora da cavidade. O principal fator que dirige para uma ou outra estrutura é o volume dos grupos próximos ao átomo de nitrogênio, que é o ponto de ancoragem do amônio no calixareno. Este trabalho tem por objetivo o estudo da estrutura de diferentes complexos no estado sólido por difratometria de raio x de monocristal. Assim, após a preparação dos receptores, foram utilizadas várias condições para a obtenção de cristais com aminas alifáticas. Foi obtido o monocristal do complexo entre 1, 5-pentanodiamina e *p-terc*-butilcalix[6]areno com estequiometria 1:1 e sua estrutura resolvida, mostrando um arranjo unidimensional infinito de ligações de hidrogênio, onde os grupos amônios conectam as unidades de calixareno através de ligações de hidrogênio. O macrociclo na forma de difenolato adota a conformação 1, 2, 3-alternada, formando dois semi-cálices. Os dois grupos NH_3^+ do pentanodiamônio se localizam em diferentes pontos: um deles ocupa o centro de um semicálice, em uma posição endo, com contato entre os hidrogênios e os anéis aromáticos e outro está fora da cavidade definida pelos anéis aromáticos, interagindo simultaneamente com os fenolatos de dois calixarenos e com uma acetonitrila. Estas interações levam a fortes distorções da cadeia carbônica, com conformações *gauche* e *eclipsada*. O outro semicálice está ocupado com uma molécula de THF. Atualmente, estamos em fase de obtenção de complexos de calix[6]arenos com grupos funcionais $-\text{NO}_2$ e $-\text{SO}_3\text{H}$.