

## ***Se as moléculas falassem umas com as outras.***

Dulce Belo

Centro de Ciências e Tecnologias Nucleares, Instituto Superior Técnico, Universidade de Lisboa

Estrada Nacional 10, Km 139,7

2695-066 Bobadela LRS

Esta história poderia começar com o “Era uma vez” das fábulas tradicionais, onde animais falam e se exprimem, à semelhança de ti e de mim. No entanto a história aqui é outra, é a de pequenas moléculas inteligentes que comunicam entre si, que têm o seu próprio código, o seu alfabeto, toda uma tabela periódica e tantos átomos, tantas possibilidades de se combinarem entre si!

Cada molécula tem uma identidade própria, tem um nome. E essa identidade revela-se através, por exemplo, das interações que estabelece com as outras moléculas, suas vizinhas. Tudo na molécula a define e a condiciona na relação com as outras: o seu tamanho, a sua forma, os átomos que a constituem, como estão ligados entre si, se é neutra ou se tem carga positiva ou negativa. Se as estudarmos muito de perto e prestarmos atenção suficiente, nós os químicos, podemos com jeito e alguma criatividade, tentar perceber essa linguagem, e usar esse conhecimento para desenhar novas moléculas que falem a “língua” que nos interessa (para obtermos, por exemplo um determinada propriedade física). A isto chama-se Engenharia Cristalina.

Neste seminário vou-vos falar sobre algumas moléculas muito especiais e que compõem os chamados Metais Moleculares. Há mais de vinte anos que tento entender a linguagem destas moléculas.

Como todos sabemos uma das propriedades físicas mais conhecidas dos metais, e que lhe atribuímos automaticamente, é a sua capacidade de conduzir a eletricidade. Exemplos de metais são o ouro, a prata, o cobre, o ferro... Mas existem outros metais que não estes, os chamados Metais Moleculares que revelam as mesmas propriedades de condução elétrica dos metais tradicionais. Digamos que são uma espécie de primos muito, muito afastados. Para além de apresentarem esta mesma propriedade física, estes materiais moleculares “inteligentes” pouco ou nada têm em comum com os metais tradicionais. A grande diferença começa logo pelo facto de os metais tradicionais ou serem baseados em elementos puros

ou nas suas ligas, enquanto que estes são baseados em moléculas, muitas vezes orgânicas, que é como quem diz baseados na química do carbono. Além disso são leves e muitas vezes transparentes, propriedade alheia aos outros metais. Outra vantagem é, através da tal engenharia cristalina, podermos juntar à condutividade elétrica dos metais moleculares outras propriedades interessantes, como por exemplo o magnetismo.

Todas estas propriedades nos materiais moleculares advém das interações das moléculas (da forma como as moléculas falam..) no estado sólido. Sempre. Aqui uma molécula sozinha não é nada.

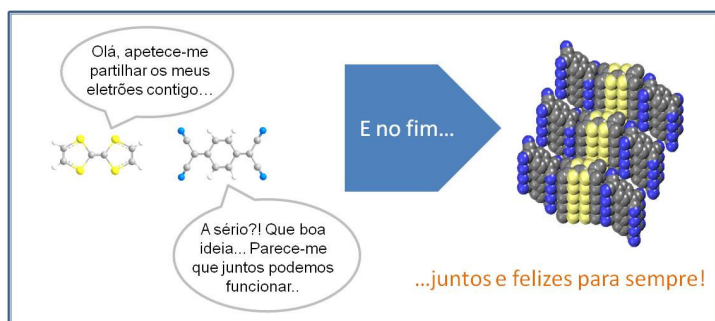


Figura 1: o encontro do TTF (do lado esquerdo) com o TCNQ (do lado direito).

Na Ciência, e na Vida em geral, é muito importante que olhemos com olhares novos para coisas antigas. Mudar de perspetiva pode revelar-se muitas vezes surpreendente. E foi isso que um senhor chamado McCoy fez, há mais de 100 anos.

Naquele tempo, todos os compostos orgânicos eram vistos obrigatoriamente como materiais isoladores, desprovidos de qualquer interesse eléctrico e magnético. No entanto em 1911 McCoy<sup>1</sup>, postulou que materiais moleculares, baseados em moléculas orgânicas, poderiam exibir condutividades eléctricas elevadas, se “falassem” da forma certa, umas com as outras. Foi preciso esperar mais de 40 anos para que se provasse que ele tinha razão e o primeiro composto orgânico onde foi observada uma condutividade eléctrica elevada foi um brometo de perileno,  $\text{PerBr}_x$ , estudado por Akamatu<sup>2</sup> no início da década de cinquenta.

Desde então, foram preparados outros materiais moleculares condutores, mas o TTF(TCNQ),<sup>3</sup> completamente caracterizado em 1973, foi o primeiro composto molecular a serem atribuídas propriedades metálicas, típicas de um metal (como o cobre ou o ouro). O

primeiro supercondutor, baseado numa molécula chamada  $(\text{TMTSF})_2\text{PF}_6$ ,<sup>4</sup> foi obtido em 1980, por D.Jérome.



Figura 1. Um condutor<sup>5</sup> e um supercondutor orgânico<sup>6</sup>: os átomos “amarelos” são enxofre, os cinzentos são carbonos, os brancos hidrogénios e os laranjas selénios.

Hoje são conhecidos, entre os materiais moleculares, milhares de metais e cerca de uma centena de supercondutores.<sup>7</sup> Uma das moléculas mais famosas é o ET, assim chamada porque é contemporânea do filme com o mesmo nome do Steven Spielberg (para conheceres este e os outros compostos dá uma espreitadela à Figura 2).

Nos finais dos anos 90 (e é aqui que eu entro nesta história...) a ideia de que era possível preparar um novo tipo de metal molecular baseado numa única espécie neutra, começou a ganhar forma. Até aqui todos os Materiais Moleculares conhecidos tinham por base duas moléculas, vinham sempre aos pares de moléculas, uma que doava eletrões e outra que os aceitava. Trabalhar apenas com uma molécula é muito menos confuso, temos apenas uma molécula a “falar”. Foi no virar do novo milénio que os primeiros “metais moleculares neutros” (foi assim que lhes chamámos) foram preparados, sendo os primeiros o  $\text{Ni}(\text{tmdt})_2$ <sup>8</sup> e o  $\text{Au}(\alpha\text{-tpdt})_2$ .<sup>9</sup> (Psiuuuu, um segredo: este último foi desenhado por mim, depois de falar com umas moléculas amigas...).

Nos últimos anos foram dados os primeiros passos no processamento destes materiais como componentes de dispositivos eletrónicos, fazendo nascer assim a *eletrónica molecular* (que quase parece um bom tema de filmes de ficção científica...)



Figura 2: O quadro de honra dos Materiais Moleculares (MM).

Se aceites o convite, é nesta aventura pelo maravilhoso mundo dos mat rias moleculares que este semin rio te convida a embarcar e no final, talvez, entendas melhor do que falam algumas mol culas...

## Referências

---

- <sup>1</sup> H.N. McCoy, *J.Am.Chem.Soc.*, **1911**, 33,273
- <sup>2</sup> H. Akamatu, *Nature*, **1954**, 173, 168
- <sup>3</sup> a) L.B.Coleman, *Solid State Comm...*, **1973**, 12, 1125; b) J.P.Ferraris, *J. Am.Chem.Soc.*, **1973**, 95, 948
- <sup>4</sup> D.Jérôme, *J.Phys.Lett.*, **1980**, 41, 95.
- <sup>5</sup> Imagem do carocha retirada de [http://espero\\_que\\_o\\_facebook\\_aceite.blogs.sapo.pt/290884.html](http://espero_que_o_facebook_aceite.blogs.sapo.pt/290884.html)
- <sup>6</sup> Imagem do carrod e formula um retirada de <http://newsexclusivo.com.br/papel-de-parede-de-carros-sport/papel-de-parede-de-carros-sport-formula-1/>
- <sup>7</sup> a) J.M.Williams in *Organic Superconductors (including Fullerenes)*, R.N.Grimes, Ed. (Prentice-Hall, Englewoods Cliffs, NJ, 1992), pp. 1-400; b) P.Cassoux in *Chemistry of Advanced Materials, An Overview*, L.V.Interrante, M.J.Hampden-Smith, eds. (Wiley-VCH, New York, 1998), pp.19-72.
- <sup>8</sup> H.Tanaka, Y.Okano, H.Kobayashi, W.Susuki, A. Kobayashi, *Science*.
- <sup>9</sup> D.Belo, H.Alves, E.B.Lopes, M.T.Duarte, V. Gama, R.T.Henriques, M.Almeida, A. Pérez-Benítez, C.Rovira, J.Veciana, *Chem. Eur.J.*, **2001**, 7, 511.