

## Estrutura Cristalina e Supramolecular do pseudo-oxocarbono 1,2-dianilinoesquaraína.

C. E. Silva<sup>a</sup>, R. Diniz<sup>a</sup>, Nivaldo L. Speziali<sup>b</sup>, L. F. C. De Oliveira<sup>a</sup>.

<sup>a</sup>Núcleo de Espectroscopia e Estrutura Molecular, Departamento de Química, Instituto de Ciências Exatas, Universidade Federal de Juiz de Fora, Juiz de Fora – MG, Brasil. <sup>b</sup> Departamento de Física - ICEx, Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte – MG, Brasil.

Oxocarbonos são diânions (ou ácidos) cíclicos compostos exclusivamente por átomos de carbono e oxigênio ( $C_nO_n^{2-}$ ). Estas espécies químicas, bem como seus derivados (pseudooxocarbonos), são conhecidas por suas aplicações em fotônica e em óptica não linear (NLO) [1]. Esta classe de compostos também tem chamado a atenção pela versatilidade com que atuam nas interações intermoleculares, o que as torna extremamente atraentes no estudo de estruturas supramoleculares, materiais nanoestruturados e principalmente na engenharia de cristais. A considerável reatividade dos ácidos esquárico ( $H_2C_4O_4$ ) e crocônico ( $H_2C_5O_5$ ) produz derivados nos quais estas interações podem ser moduladas, potencializadas ou suprimidas, fazendo destes os oxocarbonos mais investigados.

O presente trabalho apresenta a estrutura cristalina e a investigação sob uma perspectiva supramolecular de um derivado do ácido esquárico obtido a partir da substituição das hidroxilas por anilinas. A esquaraína 1,2-dianilino-ciclobuteno-3,4-diona (ACSQ) cristaliza-se no grupo espacial Pbcn, cuja a célula unitária é:  $a = 26,5911(8)$  Å,  $b = 6,1445(10)$  Å e  $c = 7,5515(5)$  Å. A Figura 1 apresenta a estrutura cristalina desta esquaraína. Os comprimentos de ligação C1-O1 [ $1,226(1)$  Å] e C2-N2 [ $1,332(1)$  Å] mostram caráter de dupla ligação. A distância média da ligação CC no anel

