

## Obtenção de compostos de coordenação de metais de transição divalentes com glifosato por síntese hidrotérmica

Wagner S. Sobral (PG), Alan H. Azevedo (IC), Guilherme P. Guedes (PQ), Marcelo H. Herbst (PQ)  
\*wsoutos@bol.com.br

Departamento de Química, Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro, UFRRJ, Seropédica - RJ

Palavras Chave: glifosato, compostos de coordenação, difração de raios-X

### Introdução

O interesse na síntese hidrotérmica de compostos de coordenação de metais de transição com ligantes organofosforados vem crescendo nos últimos anos [1]. O controle das condições da reação química visa obter monocristais e, assim, determinar a estrutura cristalina através de análise por cristalografia de raios-X. Os objetivos deste trabalho são a síntese e a caracterização de complexos de metais de transição divalentes (Co, Cu, Ni e Zn) com o glifosato (N-fosfometilglicina) a partir da metodologia de Han *et al.*, que obteve monocristais do complexo de Co(II) com o glifosato. As reações foram feitas pela adição de glifosato, acetato do metal, HCl 6M, H<sub>2</sub>O e etanol [2]. Os reagentes foram misturados em um reator de aço inox com camisa de PTFE e reagiram a 120°C e pressão autóloga por 48 horas em mufla digital. A síntese foi projetada numa razão estequiométrica de 1:1 (ligante:íon metálico). Os sólidos obtidos foram caracterizados por espectroscopia no infravermelho (Bruker Vertex 70), difratometria de raios-X de pó (Shimadzu LabX XRD-600, Cu-K $\alpha$ ), e fluorescência de raios-X (Shimadzu, FRX-6300).

### Resultados e Discussão

A análise dos espectros de IV dos produtos das sínteses com Co e Zn revelaram mudanças em comparação com o espectro de IV do glifosato. Observou-se que a carbonila do grupo COOH e o estiramento  $\nu_{as}$  do carboxilato (RCOO<sup>-</sup>) do glifosato que absorvem em 1716 cm<sup>-1</sup> e 1733 cm<sup>-1</sup> respectivamente são ausentes nos espectros dos produtos. Por outro lado, são observadas duas bandas, por volta de 1600 cm<sup>-1</sup> e 1400 cm<sup>-1</sup>, ausentes no espectro do glifosato. Estas duas bandas são atribuídas respectivamente aos estiramentos  $\nu_{as}$  e  $\nu_s$  do grupo carboxilato. A diferença entre os números de onda,  $\Delta\nu = \nu_{as} - \nu_s$ , por volta de 200 cm<sup>-1</sup>, indicou que o carboxilato está complexado de forma monodentada. Uma banda em 917 cm<sup>-1</sup> observada no espectro do glifosato, atribuída ao grupo fosfonato (P-OH), é ausente nos espectros dos produtos e, em vez disso, uma nova banda aparece em aproximadamente 900 cm<sup>-1</sup> atribuída ao estiramento (P-OM). A banda em 1561 cm<sup>-1</sup> no espectro do glifosato atribuída à deformação angular do grupo amino, não foi observada no espectro dos produtos, pois se encontra sobreposta às bandas atribuídas aos grupos carboxilato.

A Tabela 1 lista a evidência ou não de complexação através dos resultados obtidos por IV, DRX de pó e de FRX das amostras. As caracterizações dos produtos por DRX possibilitaram a distinção das fases cristalinas existentes nas amostras. As análises por FRX permitiram inferir sobre a estequiometria e a pureza dos produtos obtidos.

Tabela 1- Evidência de complexação com glifosato.

Metal	IV	DRX	FRX
Co	Sim	Sim	Sim
Cu	Não	Não	Não
Ni	Não	Não	Não
Zn	Sim	Sim	NR

NR: não realizado até o momento.

A partir da reação com o Co(II) foram obtidos monocristais e sua análise por DRX mostrou que foi reproduzido o resultado obtido por Hang *et al.*, o qual obteve um polímero de coordenação linear com estrutura cristalina triclinica. No entanto, ao se testar a metodologia para as reações com Ni(II) e Cu(II), observou-se que não houve qualquer reação do glifosato com Ni(II) ou Cu(II). Os dados de IV e DRX obtidos para a amostra de Zn(II), por outro lado, indicam a complexação do Zn(II) com o glifosato, embora não tenham sido obtidos até o momento monocristais.

### Conclusões

Nas condições hidrotérmicas empregadas neste trabalho, o glifosato apresentou boa capacidade de coordenação frente ao Co e Zn, como evidenciado pelo o valor de  $\Delta\nu$  no espectro de IV, que indicou que o carboxilato está coordenado de forma monodentada. A metodologia descrita na literatura foi reproduzida com sucesso para Co(II), porém o glifosato não complexou ao Cu nem ao Ni nessas condições, indicando que elas devem ser modificadas.

### Agradecimentos

FAPERJ (APQ-1/2012), IEN pelas análises de DRX-pó e FRX, e LDRX-UFF.

<sup>1</sup>Batten, S. R., Neville, S. M., Turner, D. R.; Coordination Polymers: design, analysis and application. RSC, Cambridge, UK, 2009.

<sup>2</sup>Han, G-F. *et al.*; Z. Anorg. Allg. Chem., **2008**, 634, 1991.