

Síntese e Caracterização e Estudos Espectroscópicos dos Polímeros de Coordenação $\text{Ln}_2(5\text{AIP})_5\cdot 4\text{H}_2\text{O}$ ($\text{Ln} = \text{Eu(III)}$ e Gd(III))

Graziele da C. Cunha^a (IC), Marcelo O. Rodrigues^a (PG)*, Alessandra R. Mesquita^a (IC), Ricardo O. Freire^b (PG), Nivan B. Costa Jr^a, (PQ), Maria E. de Mesquita^a (PQ).

^a Departamento de Química – UFS E-mail: marcelozohio@pop.com.br

^b Departamento de Química Fundamental -UFPE.

Palavras Chave: Európio, Lantanídeos, Polímeros de Coordenação

Introdução

A construção de polímeros de coordenação tem sido um campo de rápido crescimento, em estudos relacionado a Engenharia de Cristais e Química de Materiais, devido a formação compostos nanoporosos com intrigantes estruturas, além da potencial aplicabilidade em catálise, reconhecimento molecular, armazenamento de gases e métodos diversos de separação¹. No âmbito destas perspectivas uma ampla geração de ligantes multifuncionalizados tem sido desenvolvida e utilizada, entretanto os policarboxilatos aromáticos destacam-se principalmente pela rigidez estérica e pela excepcional estabilidade química, que ocasiona compostos com fascinantes arquiteturas moleculares e elevada estabilidade térmica³. Em contrapartida os dois átomos de oxigênios presentes no grupo carboxilato sugerem diversos modos de coordenação ao metal, resultando em baixo grau de previsibilidade estrutural².

Neste trabalho será reportado a síntese, caracterização e as propriedades espectroscópicas, dos complexos $\text{Ln}_2(5\text{AIP})_5\cdot 4\text{H}_2\text{O}$ ($\text{Ln} = \text{Eu(III)}$ e Gd(III)), 5AIP = ácido 5-aminoisoftálico além de estudos teóricos para o cálculo da geometria utilizando o método SMLC/AM1 ("Sparkle Model for Lanthanide Complexes / Austin Model 1") para o polímero de Eu(III).

Resultados e Discussão

A geometria calculada para o polímero de coordenação $\text{Eu}_2(5\text{AIP})_5\cdot 4\text{H}_2\text{O}$ calculada a partir do modelo sparkle, é composta por 14 átomos de oxigênios, sendo 10 provenientes do 5AIP e 4 das quatro moléculas de água. A análise de C, H e N dos complexos $\text{Eu}_2(5\text{AIP})_5\cdot 4\text{H}_2\text{O}$ (C= 35,54% H= 2,244% e N=4,925%) são compatíveis com as formulações propostas.

O espectro vibracional na região de IV do complexo $\text{Eu}_2(5\text{AIP})_5\cdot 4\text{H}_2\text{O}$ apresenta uma banda intensa em 1562cm^{-1} atribuída ao estiramento dos grupos carboxilatos do 5-amino isoftálico, e estando deslocada para aproximadamente em 1629cm^{-1} no espectro de IV da forma ácido do ligante. Estes dados sugerem a coordenação do íon Eu(III) ao 5AIP através do grupo COO^- .

O espectro de emissão do complexo $\text{Gd}(5\text{AIP})_3\cdot 2\text{H}_2\text{O}$ foi obtido a temperatura ambiente através da excitação do complexo em 220 nm, correspondendo a região de absorção do ligante. Este espectro apresenta uma banda intensa e bem resolvida em 589nm (16977cm^{-1}) atribuída ao nível tripleto do ligante que está situada abaixo do nível emissor $^5\text{D}_0$ (17250cm^{-1}) do íon Eu^{+3} , podendo portanto justificar a inexistência da luminescência no complexo $\text{Eu}_2(5\text{AIP})_5\cdot 4\text{H}_2\text{O}$.

Conclusões

Os dados de análise elementar CHN e dos espectros vibracionais são condizentes com a coordenação do 5AIP ao íon Eu(III). A ausência de luminescência apresentada pelo polímero $\text{Eu}_2(5\text{AIP})_5\cdot 4\text{H}_2\text{O}$ pode ser justificada pelo tripleto do ligante estar abaixo do nível emissor do metal

Agradecimentos

CNPQ - PIBIC

¹Ye B.-H., Tong M.-L., Chen X. M.. *Coordination Chemistry Reviews*, 249, 545, 2005

⁴ Yong Bok Go, Xiqu Wang, Ekaterina V. Anokhina & Allan J.Jackson. *of 1. Inorganic Chemistry* 44, 8265, 2005