

Desenvolvimento de Catalisadores de Lantanídeos Imobilizados em Sílica Porosa para Hidrólise de Ésteres Fosfóricos

Solange de Oliveira Pinheiro¹ (PG), Pedro Hermano Menezes de Vasconcelos^{1*} (PG),
Kaline Rodrigues Carvalho¹ (IC), Elis Cristina Chagas Gomes¹ (PG), Elisane Longhinotti² (PQ).

¹Departamento de Química Orgânica e Inorgânica - Universidade Federal do Ceará - Cx. Postal 12200 CEP 60455-960 Fortaleza, CE

²Departamento de Química Analítica e Físico-Química - Universidade Federal do Ceará, [*pedro_hermano@yahoo.com.br](mailto:pedro_hermano@yahoo.com.br)

Palavras Chaves: Lantanídeo, Sílica, BDNPP.

Introdução

Na década de 50, foram desenvolvidos agentes nervosos muito tóxicos classificados como agentes nervosos do tipo V. A maioria destes agentes nervosos são ésteres fosfóricos, possuindo assim elevado tempo de meia vida¹. O impacto ambiental do processo de destruição de estoques destes compostos é de grande interesse. Íons lantanídeos já têm sido usados eficientemente para hidrólise de ésteres fosfóricos². Uma alternativa interessante pode ser o uso de íons lantanídeos imobilizados em esferas de sílica modificada para aplicação de catalisadores heterogêneos nas reações de hidrólise das ligações P-O.

Resultados e Discussão

Os íons Sm^{3+} foram adsorvidos em esferas de sílica não modificadas e em esferas modificadas com 3-aminopropiltriétoxissilano e EDTA. As reações ocorreram em metanol sob refluxo em atmosfera inerte e agitação por 24 h. Os dados da Tabela 1 evidenciam que a quantidade de íons samário adsorvidos aumenta de 8,74 para 15,13 % em massa quando se tem a presença dos grupos carboxilatos do EDTA.

Tabela 1. Resultados de fluorescência de raios-X.

Amostra	Elemento	(%) Massa
Si-Sm	Si	84,611
	Sm	8,740
Si-APTS-EDTA-Sm	Si	72,561
	Sm	15,131

Com resultados de termogravimetria e de isotermas de adsorção determinou-se a área superficial da amostra de Sil-APTS-EDTA ($460 \text{ m}^2 \cdot \text{g}^{-1}$) e o grau de funcionalização ($2,60 \text{ grupos OH} \cdot \text{nm}^{-2}$). Dessa maneira pode-se determinar a relação de 4 grupos OH/íon Sm^{3+} , sugerindo que cada íon Sm^{3+} encontra-se coordenado a 4 grupos OH. Como a coordenação máxima do lantanídeo, entre 8 e 12, não foi alcançada, há a possibilidade de esses íons coordenarem-se com íons hidróxidos do meio aumentando a sua atividade catalítica nas reações de hidrólise de fosfodiéster. O espectro vibracional da amostra Sil-APTS-EDTA-Sm, é bastante similar ao espectro da amostra Sil-APTS-EDTA, Tabela 2, entretanto observa-se o surgimento de uma banda 1725 cm^{-1} , que pode ser atribuída ao estiramento do 33^{a} Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

grupo C=O, que antes não aparecia devido aos elétrons π estarem se deslocando entre as duas ligações C-O. Após a coordenação do íon Sm^{3+} , a ressonância fica comprometida, acarretando no surgimento da banda. O composto Sil-APTS-EDTA-Sm, apresentou uma moderada atividade catalítica na hidrólise do bis(2,4-dinitrofenil) fosfato (BDNPP), como é evidenciado pelo espectro eletrônico na região do UV-Vis, Figura 1, uma vez que há o aumento da absorção em 360 e 400 nm, características do produto de hidrólise, o íon 2,4-dinitrofenolato.

Tabela 2. Principais atribuições das bandas.

Amostra	Bandas (cm^{-1}),	Atribuição
Si-APTS-EDTA	2925	$\nu(\text{C-H})$
	1640	$\nu_{\text{sim}}(\text{COO}^-)$
	1400	$\nu_{\text{assim}}(\text{COO}^-)$
Si-APTS-EDTA-Sm	2925	$\nu(\text{C-H})$
	1635	$\nu_{\text{sim}}(\text{COO}^-)$
	1410	$\nu_{\text{assim}}(\text{COO}^-)$
	1725	$\nu(\text{C=O})$

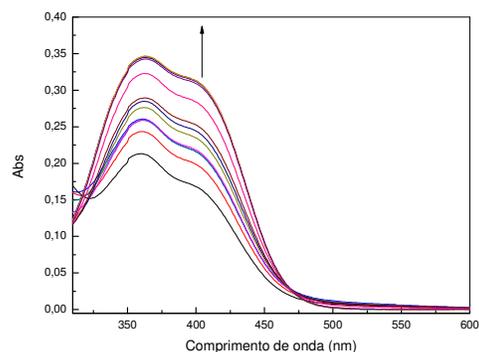


Figura 1. Cinética da reação de hidrólise.

Conclusões

Os dados obtidos evidenciam que se obteve esferas de sílica modificadas com íons Sm^{3+} , e que estes compostos se mostram promissores na hidrólise de ésteres fosfóricos.

Agradecimentos

UFC, CNPq, CAPES.

¹ Yang, Y.C.; Szafraniec, L.L.; et. al; *J. Org. Chem.* **1993**, 58, 6964.

² Longhinotti, E.; Domingos, J.B.; da Silva, P.L.F.; Nome, F. *J. Phys. Org. Chem.* **2005**, 18, 167.