

Síntese e caracterização de complexos de picratos de lantanídeos(III) com ligante derivado da pirimidona

Pedro Miranda Jr¹ (PQ), Natalia C.B. Alves¹ (IC)*, Eliana M. Aricó² (PQ), Fátima M.S.Carvalho² (PQ), Mônica F.Z.J. Amaral³ (PG), Hélio A. Stefani³ (PQ) e Júlio Zukerman-Schpector⁴ (PQ)

¹Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia de São Paulo – IFSP, ²Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares – IPEN, ³Universidade de São Paulo – USP, ⁴Universidade Federal de São Carlos - UFSCAR

*ts.nati@hotmail.com

Palavras Chave: lantanídeos, pirimidona, infravermelho

Introdução

A química de coordenação dos lantanídeos é uma das áreas de pesquisa da química inorgânica motivada pelas diversas aplicações desses compostos, tais como lasers, sondas luminescentes e catalisadores¹. Picratos de lantanídeos têm sido empregados como reagentes precursores na síntese de compostos de adição². Compostos orgânicos derivados da pirimidona, por apresentar oxigênio e nitrogênio como átomos doadores de elétrons, podem ser utilizados como ligantes na obtenção de complexos lantanídicos estáveis ao ar, pois sua estrutura preenche requisitos eletrônicos e estéricos da esfera de coordenação desses íons metálicos. Os complexos sintetizados a partir da interação de picratos de lantanídeos e o ligante pirimidona, em meio etanólico, foram caracterizados por análise elementar de CHN, FTIR e difração de raios X pelo método do pó.

Resultados e Discussão

O ligante derivado da pirimidona, 1-Benzoil-2(S)-isopropil-5-fenil-2,3-dihidro-4(H)-pirimidin-4-ona, fórmula molecular $C_{20}H_{20}N_2O_2$, estrutura química representada na Figura 1, foi previamente sintetizado a partir de reações de acoplamento cruzado de Suzuki-Miyaura com a 2-(S)-isopropil-5-iodopirimidinona³.

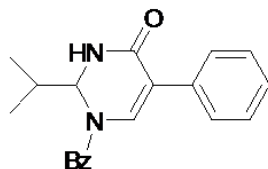


Figura 1: Estrutura química do ligante

A partir dos dados de análise elementar de C, H e N, obtidos em equipamento Perkin Elmer Série 2-2400, verificou-se que os complexos sintetizados apresentam estequiometria $[Ln(pic)_3(C_{20}H_{20}N_2O_2)_2]$ (Ln = La, Pr, Nd, Sm, Eu e Gd; pic = picrato).

A partir dos espectros de absorção na região do infravermelho, registrados em um espectrômetro Nicolet FTIR-8100, em matriz de KBr, verificou-se que os ânions picratos permanecem coordenados de forma bidentada, pelos átomos de oxigênios

fenólico e de um o-nitrogrupo, como no sal precursor. O deslocamento da banda de estiramento do grupo amida do ligante livre de 1654 cm^{-1} para cerca de 1634 cm^{-1} nos compostos permite inferir que a coordenação ocorre pelo átomo de oxigênio deste grupo. Os espectros apresentaram diversas bandas, sendo as mais intensas observadas para todos os compostos da série (Figura 2). Os difratogramas foram obtidos utilizando-se um difratômetro de raios X RIGAKU MINIFLEXII, empregando-se a radiação CuK_{α} de $\lambda = 1,542562\text{ \AA}$ com 2θ variando entre 20° a 70° com varredura de $0,05^{\circ}/s$. Os resultados indicam que os complexos apresentam baixa cristalinidade.

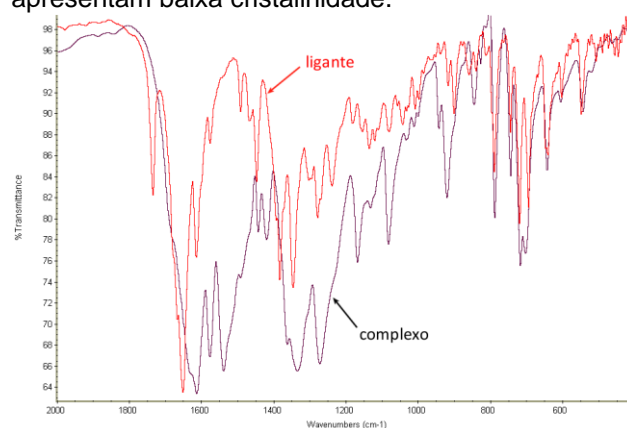


Figura 2: Espectros de absorção na região do infravermelho do ligante e do complexo de Sm.

Conclusões

Os complexos sintetizados apresentam a estequiometria $[Ln(pic)_3(C_{20}H_{20}N_2O_2)_2]$. A partir dos espectros FTIR verifica-se que os ânions picratos mantêm a coordenação bidentada e os ligantes se coordenam pelo átomo de oxigênio do grupo amida. Os compostos apresentam baixa cristalinidade, conforme observado nos difratogramas de raios X.

Agradecimentos

FAPESP e CNPq.

¹Martins T.S.; Isolani, P. C. *Química Nova*, **2005**, 28, 111.

² Miranda Jr, P., Zukerman-Schpector J., Isolani, P.C., Vicentini, G., Zinner L.B., *Journal of Alloys and Compounds*, **2002**, 344, 141.

³ Stefani, H.A., Amaral, M.F.Z.J., Rangel, G.R., Caporali, J.V., Juaristi, E. *Eur. J. Org. Chem.* **2010**, 6393.