

Síntese e caracterização de um novo polímero de coordenação 2D de Nd(III) com ligante derivado do ácido 5-metil-2-carboxílicopirazínico.

Daniella Olandim Reis (PG)^{1*}, Maria Vanda Marinho (PG)¹, Wdeson P. Barros (PG)¹, Carlos B. Pinheiro (PQ)², Humberto O. Stumpf¹ (PQ). *daniolandim@ufmg.br*

¹Departamento de Química, ICEx, UFMG. Av. Antônio Carlos 6627, Pampulha, 31270-901, Belo Horizonte, MG.

²Departamento de Física, ICEx, UFMG. Av. Antônio Carlos 6627, Pampulha, 31270-901, Belo Horizonte, MG.

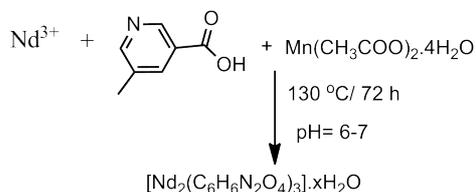
Palavras Chave: carboxilato, lantanídeos, síntese solvotérmica

Introdução

O crescimento das redes metal-orgânicas (MOFs), contendo metais 3d-4f com diferentes ligantes orgânicos, tem sido dirigido por suas fascinantes topologias estruturais bem como suas potenciais aplicações.¹ Redes MOFs podem ser preparadas pela simples combinação de um íon metálico com ligantes orgânicos contendo diferentes átomos doadores. MOFs contendo lantanídeos têm atraído grande interesse devido à capacidade de incorporação de um centro com propriedades fotoluminescentes e magnéticas.² Fortuitamente, a alta afinidade dos lantanídeos por átomos doadores de oxigênio torna os ligantes carboxilatos excelentes candidatos para a formação de novas arquiteturas estruturais. Dessa forma, no presente trabalho reportamos a síntese hidrotérmica e caracterização de uma nova rede 2D de neodímio(III) contendo um ácido carboxílico-pirazínico.

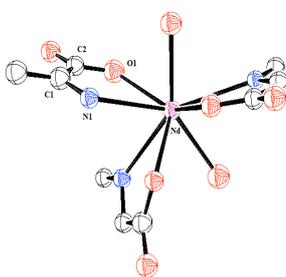
Resultados e Discussão

A uma solução aquosa do ácido 5-metil-3-carboxílicopirazínico, adicionou-se uma solução aquosa de NaOH na proporção 1:1. Em seguida, foram adicionadas soluções aquosas de Nd(CH₃COO)₃.6H₂O e Mn(CH₃COO)₂.4H₂O, conforme o esquema abaixo.



Após 30 minutos de agitação, a suspensão foi deixada a 130 °C por 3 dias na estufa (síntese hidrotérmica), resultando na formação de cristais amarelos em formato de agulha. Estes foram filtrados e caracterizados por espectroscopia de absorção na região do infravermelho (IV) e difração de raios X de monocristal. IV (KBr, cm⁻¹): ν(O-H) 3399; ν_{as}(C=O) 1624; ν_s(C=O) 1318; ν(C=C) e ν(C=N) 1484,1447; ν(C-N) 1393; δ(C-H) 1179. Através da análise do espectro IV, pode-se sugerir o modo de coordenação do grupo carboxilato

pirazínico dado pelo valor de Δ (ν_{assimétrico} - ν_{simétrico}).³ O valor de Δ = 289 cm⁻¹ encontrado para o carboxilato no complexo indica o modo de coordenação bidentado em ponte, comparado ao valor de Δ do ligante livre. Esta conclusão é suportada pela difração de raios X de monocristal. A estrutura molecular é exibida na Figura 1.



A estrutura cristalina mostra cada átomo de Nd(III) com nove sítios de ligação (átomos de oxigênio e nitrogênio) do carboxilato pirazínico. Foi observada, ainda, a carboxilação do grupo metila.

Figura 1. Estrutura molecular [Nd₂(C₆H₆N₂O₄)₃].xH₂O. Moléculas de água foram omitidas para melhor visualização.

Como inferido pelo espectro IV, os ligantes carboxílicopirazínicos encontram-se coordenados em ponte, formando o polímero 2D (Figura 2).

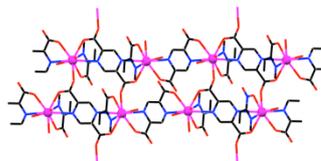


Figura 2- Polímero 2D de [Nd₂(C₆H₆N₂O₄)₃].xH₂O.

Conclusões

Foi sintetizada uma nova rede de neodímio(III) coordenado a um novo ácido dicarboxílicopirazínico obtido pela carboxilação do grupo metila do ácido utilizado. Adicionalmente, é um composto promissor para apresentar propriedades fotoluminescentes e magnéticas interessantes. Outras análises de caracterização do composto já estão em andamento.

Agradecimentos

CAPES, CNPq, Fapemig

¹Black, C.A., *Inorg. Chem.* **2009**, 48, 1062;

²Pointillart, F.; et al, *Chemistry a European Journal* **2007**, 13, 1602;

³Yang, L.R., *Synthetic Metals* **2011**, 161, 647.