

## SUSCEPTIBILIDADE MAGNÉTICA E ESPECTRO DE RMN DE $^1\text{H}$ DO COMPOSTO ORGANOMETÁLICO $\text{CeCp}_3\cdot\text{HMPA}$

*Eliana Maria Aricó (PQ)<sup>1</sup>, Basil Kanellakopoulos (PQ)<sup>2</sup>,  
Christos Apostolidis (PQ)<sup>3</sup>, Léa Barbieri Zinner (PQ)<sup>4</sup>*

A investigação do caráter das ligações em um composto é de fundamental importância para o conhecimento de seu comportamento químico e consequentemente da exploração de suas propriedades em possíveis aplicações.

Entre as técnicas empregadas na caracterização dos compostos organometálicos de lantanídeos, medidas de susceptibilidade magnética a várias temperaturas e espectroscopia de ressonância magnética nuclear de  $^1\text{H}$  fornecem informações valiosas quanto à perturbação dos ligantes e ainda sobre seu arranjo em esfera de coordenação o centro metálico.

O espectro de RMN de  $^1\text{H}$ , em  $\text{CDCl}_3$  do composto  $\text{CeCp}_3\cdot\text{HMPA}$ , ( $\text{Cp}^- = \text{C}_5\text{H}_5^-$ ;  $\text{HMPA} = \text{OP}[\text{N}_3(\text{CH}_3)_2]_3$ ), registrado a temperatura ambiente, exibiu desvio paramagnético, provocado pelo cátion  $\text{Ce}^{3+}$  ( $4f^1$ ), que foi calculado em relação a posição dos respectivos sinais no espectro do composto diamagnético  $\text{LaCp}_3\cdot\text{HMPA}$ . O sinal dos prótons do grupo  $\text{CH}_3$  do ligante indica que a porção  $[\text{N}(\text{CH}_3)_2]_3$  da molécula de HMPA gira livremente sobre o eixo da ligação  $\text{Ln}-\text{O}=\text{P}$ . O sinal único dos prótons do anel ciclopentadieneto evidencia a coordenação pentahapta e em posições equivalentes ao redor do íon lantanídico.

A partir medidas de susceptibilidade magnética, registradas a temperaturas variando de 4,2 a 300K, determinou-se  $\chi_g$ ,  $\chi_M$ , seu recíproco  $1/\chi_M$  e  $\mu_{\text{ef}}$ . As constantes empíricas  $C = 0,78 \text{ m}^3\text{grauMol}^{-1}$  e  $\theta = -71\text{K}$  foram calculadas através de método de regressão linear da curva  $1/\chi_M$  em função da temperatura. Os valores de  $\mu_{\text{ef}}$  versus T descrevem uma curva convexa cuja inclinação diminui com o aumento da temperatura. Este comportamento pode ser atribuído ao fato dos níveis excitados do campo cristalino encontram-se parcialmente populados, entretanto sua ocupação completa não é atingida mesmo a temperatura ambiente, visto que a curva segue uma tendência crescente apresentando a 300K  $\mu_{\text{ef}} = 5,08 \text{ (MB)}^2$  enquanto que o valor calculado para o íon cério(III) livre a esta temperatura é de  $6,43 \text{ (MB)}^2$ .

[CNPq]

1. Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, IPEN/CNEN-SP, São Paulo, SP, E-mail: eliana@usp.br.
2. Forschungszentrum Karlsruhe, Karlsruhe, Alemanha.
3. European Commission, Institut of Transuranic Elements, Karlsruhe, Alemanha.
4. Instituto de Química - USP, São Paulo, SP.