

## INVESTIGAÇÃO ESTRUTURAL INDIRETA DE COMPOSTOS INORGÂNICOS E ORGANOMETÁLICOS ATRAVÉS DE SEUS ESPECTROS DE ABSORÇÃO NA REGIÃO DO IV DISTANTE

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

A espectroscopia de absorção na região do infravermelho distante é comumente aplicada no estudo de ligações metal-ligante. Contudo como as vibrações moleculares de baixa frequência, observadas nesta região espectral, são particularmente sensíveis às alterações estruturais, esta técnica pode ser também empregada no estudo indireto da estrutura de compostos através de espectros registrados em matriz de polietileno.

Nos organolantanídicos  $\text{LnCp}_3\cdot\text{HMPA}$ , ( $\text{Ln} = \text{La}$  até  $\text{Lu}$ ),  $\text{Cp}^- = \text{C}_5\text{H}_5$  e  $\text{HMPA} = \text{OP}[\text{N}(\text{CH}_3)_2]_3$  o arranjo dos ânions  $\text{Cp}^-$  e do ligante  $\text{HMPA}$  ao redor do cátion lanthanídico confere ao composto a simetria  $\text{C}_{3v}$ . Esta simetria foi confirmada através da forma e número de bandas nos espectros de absorção na região de 300 a 50  $\text{cm}^{-1}$ . A correlação das frequências, atribuída ao estiramento  $\text{Ln}-\text{O}$  ( $\text{HMPA}$ ), com o número atômico do respectivo lanthanídeo apresenta uma tendência decrescente, concordante com o aumento da massa do centro metálico e consequentemente, com o deslocamento desta banda para região de menor energia, o que confirma também a atribuição feita a esta banda.

Outro exemplo pode ser citado através da série de compostos  $\text{Ln}(\text{CH}_3\text{SO}_3)_3\cdot x\text{H}_2\text{O}$  ( $\text{Ln} = \text{La} - \text{Tm}$   $x = 2$ ,  $\text{Ln} = \text{Yb}$  e  $\text{Lu}$   $x = 0$ ). A comparação da forma e número de bandas de seus espectros na região de 650 a 50  $\text{cm}^{-1}$  permitiu agrupá-los em quatro séries: I - ( $\text{La}$ ), II - ( $\text{Ce}$  a  $\text{Er}$ ), III - ( $\text{Tm}$ ) e IV - ( $\text{Yb}$  e  $\text{Lu}$ ). Estas séries são concordantes com as estequiometrias dos compostos e também com os dados de estrutura cristalina dos compostos isoestruturais  $\text{Ce}$ ,  $\text{Sm}$ ,  $\text{Tb}$  e do composto de  $\text{Yb}$ , posteriormente desvendadas por método de difração de Raios-X em monocristal.

Os resultados apresentados acima permitem considerar o uso da espectroscopia de absorção na região do infravermelho distante como ferramenta na investigação do isomorfismo de compostos inorgânicos e organometálicos.

[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. Instituto de Química - USP, São Paulo, SP