

# SÍNTESE DA TETRACARBOXIFTALOCIANINA DE ITÉRBIO E O ESTUDO DA INFLUÊNCIA DO MEIO NO EQUILÍBRIO DE AGREGAÇÃO

Vitória G. C. Z. Cruz<sup>1\*</sup>, Rebecca N. Silva<sup>2</sup> e Wania C. Moreira<sup>3</sup>

1. Estudante de IC da Universidade Federal de São Carlos/ UFSCar; \*[vick\\_caviola@hotmail.com](mailto:vick_caviola@hotmail.com)

2. Mestranda do Departamento de Química/UFSCar – São Carlos/SP

3. Pesquisadora do Departamento de Química/UFSCar – São Carlos/SP

Palavras Chave: *metalloftalocianina, itérbio, agregação*

## Introdução

Desde sua descoberta em 1907, as ftalocianinas (Pc) têm chamado atenção pela sua versatilidade em aplicações devido a sua alta estabilidade térmica e química. A partir dessa macromolécula, sintetiza-se as metaloftalocianinas (MPc) que, assim como a Pc, possuem uma ampla gama de atuação, como: sensores químicos, catalisadores, agentes na terapia fotodinâmica e semicondutores<sup>1</sup>. Grande parte dessas aplicações se deve ao sistema eletrônico altamente conjugado, que possibilita a condução eletrônica. Dentre as diversas ftalocianinas estudadas, as MPcs contendo metais da série dos lantanídeos têm se mostrado promissoras para a área de fotoquímica e para utilização em materiais de alta tecnologia<sup>2</sup>. A adição de substituintes, positiva ou negativamente, ao anel ftalocianina promove o aumento da solubilidade das MPc em água, o que possibilita a aplicação em outros ramos de pesquisa, tais como a atuação em sistemas biológicos e na degradação de poluentes em meio aquoso<sup>1</sup>. Entretanto, como as MPcs substituídas possuem tendência a agregação, o conhecimento do equilíbrio agregado/monômero se torna um importante fator a ser estudado, uma vez que a agregação pode interferir tanto em sua atividade catalítica, quanto em sua atuação como agente fotoquímico. Dessa forma, este trabalho tem por objetivo sintetizar a tetracarboxiftalocianina de itérbio (YbTcPc) e estudar os fatores que afetam o equilíbrio monômero/agregado.

## Resultados e Discussão

A YbTcPc foi sintetizada pela primeira vez em nosso laboratório a partir do método descrito por Mikhaelenko *et al.*<sup>3</sup> e purificada pelo método de Weber e Bush<sup>4</sup>. As tetracarboxiftalocianinas são conhecidas por não apresentarem solubilidade em água, entretanto, neste trabalho, a partir de modificações na metodologia de purificação foi possível isolar a YbTcPc na forma de sal sódico, que apresentou uma boa solubilidade no meio aquoso. O produto foi caracterizado por espectroscopia de absorção na região do infravermelho (i.v.) e do ultravioleta visível (UV-vis). O espectro de i.v. apresentou as bandas características das MPCs como a deformação C-H no plano em 1083 cm<sup>-1</sup>, estiramento isoindol em 1375 cm<sup>-1</sup> e estiramento C=C do anel benzênico em 1626 cm<sup>-1</sup>. A banda de estiramento C=O do substituinte carboxílico se mostrou sensível à forma do composto, sendo observado em 1665 cm<sup>-1</sup>, para o composto na forma de sal sódico e em 1725 cm<sup>-1</sup> para a forma ácida, comprovando a substituição do hidrogênio ácido pelo íon sódico. O espectro de absorção na região do UV- vis apresentou 2 bandas, em 665 nm e 725 nm. O alargamento da banda e o aparecimento de duas absorções são características de um equilíbrio monômero/dímero, com a espécie dimérica

absorvendo em menor comprimento de onda (665 nm). Este equilíbrio pode ser afetado alterando-se as condições do meio como pH, constante dielétrica e força iônica. Estudou-se o efeito da alteração da constante dielétrica do meio sobre o equilíbrio monômero/dímero através da adição de acetona em proporções de 20% até 80% v/v. Foi também estudado o efeito do pH do meio sobre o equilíbrio na faixa de pH de 3 a 11, utilizando-se alíquotas de HCl e NaOH para o ajuste.

Foi observado que o aumento da proporção de acetona ao meio favoreceu o aumento da concentração da espécie monomérica, enquanto que o aumento do pH provocou somente um ligeiro favorecimento da espécie dimérica. Em valores de pH inferiores a 4, a YbTcPc precipita, devido a protonação dos grupos carboxila, tornando-a insolúvel.

## Conclusões

A monoftalocianina de itérbio tetrassubstituída com grupos carboxilas pode ser obtida e isolada na forma sódica solúvel em meio aquoso.

O equilíbrio dímero/monômero presente em solução é alterado principalmente pela constante dielétrica do meio, fato evidenciado pelo favorecimento do monômero frente a adição de acetona. Tal comportamento, aliado à pouca influência observada pela alteração do pH, sugere que a agregação das espécies possa estar ocorrendo através do centro metálico e não pela interação por ligações de hidrogênio entre os grupos substituintes.

## Agradecimentos

Os autores agradecem ao Departamento de Química e a FAPESP pela estrutura concedida.

(1) Dumoulin, F.; Durmus, M.; Ahsen, V.; Nyokong, T.; *Coord. Chem. Rev.* **2010**, 23, 2792.

(2) Slota, R. *et al.*; *Molecules*. **2012**, 17, 10738.

(3) Mikhaelenko, S. A.; Solov'eva, L. I.; Luk'yanets, E. A.; *Russ. J. Gen. Chem.* **2004**, 3, 451.

(4) Weber, J. H.; Busch, D. H.; *Inorg. Chem.* **1965**, 4, 469.