

## Propriedades magnéticas de um composto dinuclear $Mn^{III}Mn^{III}$ contendo ligante oxamato e ligante auxiliar nitrogenado

Wdeson P. Barros<sup>1</sup> (PQ)\*, Willian X. C. Oliveira<sup>1</sup> (PG), Carlos B. Pinheiro<sup>2</sup> (PQ) e Humberto O. Stumpf<sup>1</sup> (PQ)

\*wdsbarros@ufmg.br

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

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

Palavras Chave: magnetismo, oxamato,  $Mn^{III}$

### Introdução

O interesse nas propriedades físicas de sistemas moleculares polimetálicos tem aumentado bastante devido à possibilidade de aplicação desses compostos no desenvolvimento de dispositivos para armazenamento de informação, spintrônica, computação quântica e refrigeração magnética.<sup>1,2</sup> Para tais aplicações é necessário o entendimento de relações fundamentais entre estrutura e comportamento magnético de uma série de compostos com diferentes topologias. Uma forma de estabelecer tais relações é estudar o comportamento de pequenas moléculas com estruturas análogas a blocos construtores de sistemas maiores. Para contribuir com o estudo magnetoestrutural de sistemas magnéticos moleculares este trabalho apresenta o estudo de um composto dinuclear obtido a partir de um complexo contendo o ligante *orto*-fenilenobis(oxamato) e  $Mn^{III}$  e como espaçador o ligante hexametilenotetramino (hmt).

### Resultados e Discussão

A reação entre  $(Me_4N)[Mn(opba)]$  e hmt (soluções em acetonitrila) levou à formação de cristais verde escuros por evaporação lenta. Os cristais foram caracterizados por análise elementar, difração de raios X de monocristal e medidas da suscetibilidade magnética em função da temperatura. Sua estrutura, com fórmula igual a  $(Me_4N)_2\{[Mn(opba)]_2(\mu\text{-hmt})(H_2O)_2\} \cdot MeCN \cdot H_2O$  (1) apresenta dois íons de  $Mn^{III}$  com geometria octaédrica conectados pelo ligante hmt e moléculas de água coordenadas nas extremidades (Fig. 1). A distância entre os íons  $Mn^{III}$  é igual a 6,3 Å.

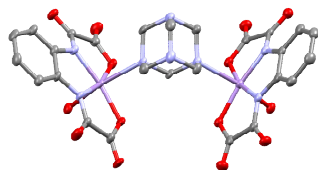


Figura 1. Estrutura cristalina do composto 1.

À temperatura ambiente o produto da suscetibilidade magnética molar pela temperatura,  $\chi_{Mn}T$ , apresentou

um valor igual a  $6,02 \text{ cm}^3 \text{ K mol}^{-1}$ , o que é compatível com íons  $Mn^{III}$  isolados magneticamente (interações magnéticas entre os íons metálicos podem ser consideradas desprezíveis devido a uma grande contribuição térmica). Este valor está de acordo com a equação para *spin-only*, considerando-se  $g_{Mn} = 2$  e  $S = 2$  para cada íon  $Mn^{III}$ , onde  $\chi_{Mn}T = 6,0 \text{ cm}^3 \text{ K mol}^{-1}$ . Com o abaixamento da temperatura o valor de  $\chi_{Mn}T$  diminui, indicando o aparecimento de interações antiferromagnéticas entre os íons metálicos. Com o ajuste teórico foi possível determinar o parâmetro de acoplamento magnético,  $J$  (considerando  $g_{Mn} = 2,0$ ), igual a  $-0,85 \text{ cm}^{-1}$ , indicando interações antiferromagnéticas fracas (devido ao grande espaçamento proporcionado pelo ligante hmt).

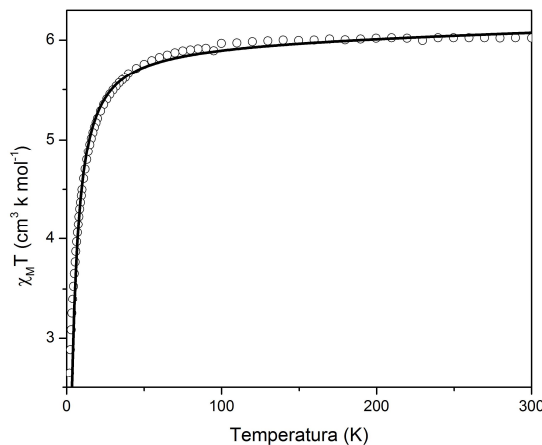


Figura 2. Curva da  $\chi_{Mn}T$  em função da temperatura.

### Conclusões

Neste trabalho foi obtido o novo complexo dinuclear  $(Me_4N)_2\{[Mn(opba)]_2(\mu\text{-hmt})(H_2O)_2\} \cdot MeCN \cdot H_2O$  onde foi possível determinar sua estrutura e analisar as propriedades magnéticas. A obtenção de estruturas com pequenas variações nos ligantes utilizados podem contribuir para estabelecer uma correlação magnetoestrutural.

### Agradecimentos

CAPES, CNPq, FAPEMIG.

<sup>1</sup> Loth, S.; Baumann, S.; Lutz, C.P.; Eigler, D.M. e Heinrich, A.J. *Science*. **2012**, 335, 196.

<sup>2</sup> Bogani, L. e Wernsdorfer, W.. *Nature Materials*. **2008**, 7, 179.