

Estudos estruturais e magnéticos de um composto contendo Cu(II) e Mn(II)

Antonio S. Florencio(IC)*¹, Marguerite Kalisz(PG)², Maria G. F. Vaz(PQ)¹, Miguel A. Novak (PQ)², Hélio S. Amorin (PQ)²

*antonio.florencio@gmail.com

¹Departamento de Química Inorgânica, Universidade Federal Fluminense

²Instituto de Física, Universidade Federal do Rio de Janeiro

Palavras Chave: Cu(II)-Mn(II), Compostos de Coordenação, Magnetismo Molecular

Introdução

Um importante campo de pesquisa em magnetismo molecular é a síntese e o estudo de sistemas heterometálicos¹. Uma estratégia para se obter esse tipo de composto é a chamada "metal-metal", onde os centros metálicos interagem através de ligantes orgânicos¹. Um grande número desses complexos foi publicado, com estudos de estruturas cristalinas e propriedades magnéticas diversas. Neste trabalho mostramos como a técnica de difração de raios-X em policristais permitiu obter informações estruturais de um composto molecular, o Mn₂[Cu₂(bopba)].8DMSO (onde H₄Et₄bopba é o bis-*o*-fenilenobis(oxamato))², e a partir destas informações entender quantitativamente as suas propriedades magnéticas do composto.

Resultados e Discussão

O sistema policristalino Mn₂[Cu₂(bopba)].8DMSO foi sintetizado a partir da reação entre o precursor (NBu₄)₄[Cu₂(bopba)] com o cloreto de manganês(II), usando o dimetilsulfóxido como solvente. Como não foi possível obter monocristais do Mn₂[Cu₂(bopba)].8DMSO, a sua estrutura foi resolvida a partir de dados de difração de raios-X em amostra policristalina. Esses dados foram obtidos na linha XPD do Laboratório Nacional de Luz Síncrotron. O refinamento dos dados mostrou que o composto organiza-se de maneira original na rede cristalina. O sistema é constituído de moléculas isoladas com dois íons de Mn(II) ligados ao bloco de partida [Cu₂(bopba)]⁴⁺ através de duas pontes oxamato (Figura 1). As esferas de coordenação dos íons Mn(II) são completadas por moléculas de DMSO.

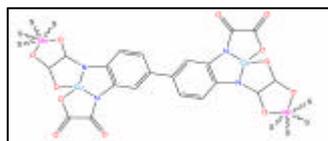
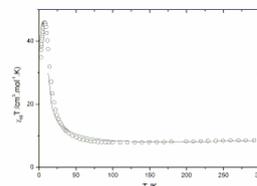


Figura 1: representação esquemática das moléculas de Mn₂[Cu₂(bopba)]S₈ (S = moléculas de DMSO).

As propriedades magnéticas do complexo foram estudadas por medida de susceptibilidade magnética (χ_M) em função da temperatura (T). A representação da curva do produto $\chi_M T$ em função da temperatura é mostrada na Figura 2. A 300 K, o valor obtido para o

$\chi_M T$ é de 8,75 cm³.mol⁻¹.K, valor abaixo do esperado por dois spins 1/2 e dois spins 5/2 não interagindo. À medida que a temperatura baixa, o valor do $\chi_M T$ começa a diminuir, até atingir um mínimo a T = 110 K. Abaixo de 110 K, o produto $\chi_M T$ aumenta e atinge um máximo em 7,2 K, para finalmente diminuir rapidamente abaixo de 7 K. Este comportamento é típico de compostos onde existem interações ferrimagnéticas entre íons Mn(II) e Cu(II). Os dados foram ajustados considerando a interação Cu(II)-Mn(II) (J), a interação inter-dímeros CuMn-CuMn (J'), e a interação inter-molecular (?), esquema permitindo descrever o composto como sendo constituído de cadeias magnéticas². O melhor ajuste foi obtido com J = -70 cm⁻¹, J' = 10 cm⁻¹, e ? = 8 cm⁻¹, confirmando a presença de interações antiferromagnéticas Cu-Mn.

Figura 2: curva representando o produto $\chi_M T$ em função da temperatura para o Mn₂[Cu₂(bopba)] (? dados experimentais, - curva



Conclusões

Neste trabalho apresentamos a estrutura cristalina e o estudo do comportamento magnético do composto Mn₂[Cu₂(bopba)].8DMSO. As informações estruturais permitiram avançar na compreensão deste sistema heterometálico, que tem propriedades magnéticas complexas, com a competição de interações antiferromagnéticas e ferromagnéticas.

Agradecimentos

CNPq, Faperj, Capes, LNLS

¹ Kahn, O. *Molecular Magnetism*, VCH, New York, 1993

² Kahn, O., et Al. *Inorg. Chem.*, **2000**, 39, 1602; Tao, R. J., Li, F. A., Zang, S. Q., Cheng, Y. X., Wang, Q. L., Niu, J. Y., Liao, D. Z., *Polyhedron*, **2006**, 25, 2153