

## Um novo complexo de cobre com possíveis aplicações no desenvolvimento de materiais moleculares

Juliana Barreto Brandão (IC)<sup>1\*</sup>, Mauricio Lanznaster(PQ)<sup>1</sup>, Carlos Basílio Pinheiro (PQ)<sup>2</sup>

\* juliana.barreto@uol.com.br

<sup>1</sup>Instituto de Química, Universidade Federal Fluminense, CEP 24020-150, Niterói-RJ.

<sup>2</sup>Instituto de Física, Universidade Federal de Minas Gerais, CEP 31270-901, Belo Horizonte - MG.

Palavras Chave: magnetos moleculares; complexos de cobre.

### Introdução

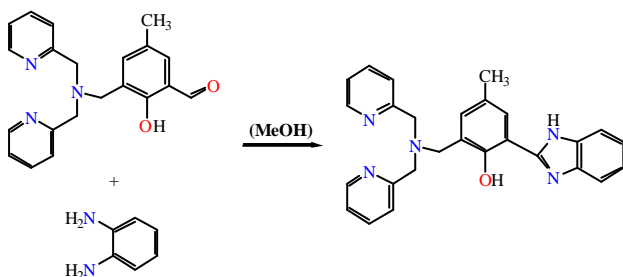
O desenvolvimento de novos materiais magnéticos baseados em moléculas vem sendo proposto como uma alternativa para os materiais magnéticos atuais constituídos de nanopartículas de ligas ou óxidos metálicos, visando a tornar os dispositivos de armazenagem e processamento de informações mais rápidos e eficientes.

Dentro deste contexto, o presente trabalho descreve a síntese e caracterização das propriedades de um complexo tri-nuclear de cobre inédito,  $[\text{Cu}_3(\text{LABI})_2(\text{OAc})_2](\text{ClO}_4)_2(\text{H}_2\text{O})_4$  (**1**) como parte de um projeto que visa ao desenvolvimento de novos materiais moleculares.

### Resultados e Discussão

Inicialmente foi sintetizado um novo ligante denominado HLABI, a partir dos precursores HLA<sup>1</sup> e o-fenilenodiamina como descreve o **Esquema 1**.

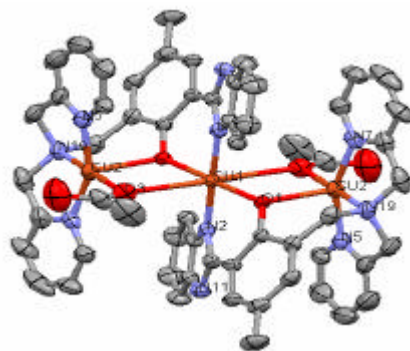
**Esquema 1:** Síntese do ligante HLABI.



Ao final do processo foi obtido um sólido na forma de uma espuma, caracterizado por espectroscopia de **IV** (KBr)  $\text{cm}^{-1}$ : 3492  $\delta(\text{O-H})$ ; 3053  $\delta(\text{N-H})$ ; 1592, 1440, 1435  $\nu(\text{C=C, C=N})$ ; 1273  $\nu(\text{C-O})$ ; 745  $\delta(\text{C-H})$ . **Análise elementar** de CHN esperada para  $\text{C}_{27}\text{H}_{16}\text{N}_5\text{O}$ : C, 74,46; H, 5,79; N, 16,08 %; obtida: C, 70,21; H, 5,27; N, 14,99 %. O composto também foi caracterizado por **RMN de  $^1\text{H}$** , ppm ( $\text{CDCl}_3$ ): 2,27 (s, 3 H,  $\text{CH}_3$ ); 3,84 (s, 2 H,  $\text{NCH}_2\text{ph}$ ); 3,94 (s, 4 H,  $\text{pyCH}_2\text{NCH}_2\text{py}$ ); 6,96 (s, 1 H, ph); 7,17-7,34 (m, 6 H); 7,61-7,70 (m, 4 H); 8,23 (s, 1 H, ph); 8,61 (d, 2 H).

A reação do ligante HLABI com acetato de cobre (II) em metanol, na presença de perclorato de sódio,

rendeu um sólido verde que foi recristalizado em metanol na presença de acetato de sódio, formando um precipitado cristalino de **1**. Estudos cristalográficos preliminares indicam que o complexo **1** apresenta uma estrutura molecular contendo duas unidades do ligante LABI coordenadas a três centros de cobre (II), ponteados por dois acetatos de forma monodentada, conforme ilustrado na **Figura 1**.



**Figura 1.** Estrutura cristalina preliminar do cátion complexo  $[\text{Cu}_3(\text{LABI})_2(\text{OAc})_2]^{2+}$ .

O composto obtido foi ainda caracterizado por espectroscopia **IV** (KBr)  $\text{cm}^{-1}$ : 3422  $\delta(\text{O-H})$ ; 1610, 1592, 1447  $\nu(\text{C=C, C=N})$ ; 1112  $\nu(\text{Cl-O})$ . **UV-Vis** (nm): 365 ( $\epsilon = 17900 \text{ cm}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{L}$ ) atribuída a processos de transferência de carga e transições  $\pi-\pi$  do ligante; 674 ( $\epsilon = 138 \text{ cm}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{L}$ ) atribuída à transições d-d. **Análise elementar** de CHN esperada para  $\text{C}_{58}\text{H}_{62}\text{Cl}_2\text{Cu}_3\text{N}_{10}\text{O}_{18}$ : C, 48,09; H, 4,31; N, 9,67 %; obtido: C, 47,32; H, 4,35; N, 9,46 %.

### Conclusões

Um novo ligante foi sintetizado, caracterizado e utilizado com sucesso para a obtenção de um complexo tri-nuclear de cobre. Estudos completos utilizando técnicas eletroquímicas e magnéticas (RPE, Squid) estão em andamento e serão apresentados futuramente.

### Agradecimentos

Agradecemos a PROPP/UFF, CAPES e FAPERJ pelo apoio financeiro, as Professoras Maria D. Vargas e Maria G. F. Vaz pela infra-estrutura de laboratório e reagentes e ao LDRX pelas análises de raios X.

---

<sup>1</sup> Lanznaster, M., *et al. Inorg. Chem.* **2002**, *41*, 5641.