

Síntese, caracterização e propriedades magnéticas do complexo $[\text{CuCl}_2(\text{C}_7\text{H}_5\text{O}_2\text{NH}_2)_2]$

Guilherme Pereira Guedes^{1*} (PG), Pedro G. Poubel (IC)¹, Maria G. F. Vaz¹ (PQ) e Miguel A. Novak² (PQ) * guilherme@vm.uff.br.

¹ Instituto de Química – Universidade Federal Fluminense – Outeiro de São João Batista, s/nº - Niterói-RJ.

² Instituto de Física – Universidade Federal do Rio de Janeiro - CP 68528-CEP:21941-972 Rio de Janeiro-RJ.

Palavras Chave: compostos de coordenação, magnetismo molecular.

Introdução

O ácido *p*-aminobenzóico (PABA) é um ligante versátil em química de coordenação. Ele pode se coordenar a íons de metais de transição tanto pelo grupo carboxilato quanto pela amina ou até ambos ao mesmo tempo, dependendo do metal utilizado na síntese¹. Este ácido tem sido utilizado como bloco construtor de sistemas supramoleculares devido a possibilidade de estabilização de estruturas cristalinas através de interações intermoleculares². Neste trabalho serão discutidas a síntese, caracterização e propriedades magnéticas de um novo composto obtido utilizando este ligante.

Resultados e Discussão

O complexo $[\text{CuCl}_2(\text{C}_7\text{H}_5\text{O}_2\text{NH}_2)_2]$, foi obtido através da reação entre o cloreto de cobre (II) anidro e o ácido *para*-aminobenzóico, em etanol. Um precipitado verde microcristalino foi formado na reação (figura 1).

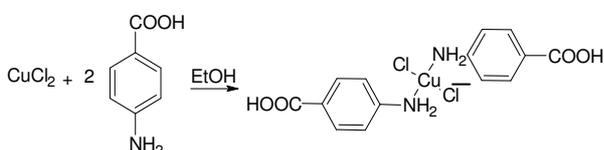


Figura 1. Esquema reacional da síntese do complexo $[\text{CuCl}_2(\text{C}_7\text{H}_5\text{O}_2\text{NH}_2)_2]$.

A caracterização do composto foi feita por espectroscopia na região do infravermelho e análise elemental. As principais absorções são: 3438 cm^{-1} (ν O-H); 3254 e 3142 cm^{-1} (ν N-H aminas aromáticas); 1572 a 1450 cm^{-1} (ν C-C anel aromático); 1245 cm^{-1} (ν C-N aminas aromáticas). *Anal. Calc.* para $\text{C}_{14}\text{H}_{14}\text{N}_2\text{O}_4\text{Cl}_2\text{Cu}$: C, 41,28; H, 3,47; N, 6,88%. Encontrado: C, 41,45; H, 3,63; N, 6,82%. Monocristais foram obtidos por recristalização em metanol, o que permitiu a resolução da estrutura cristalina do composto por difração de raios-x em monocristal. O composto cristaliza no sistema triclinico, no grupo de espaço P1, com os parâmetros de célula unitária $a = 4,6770$ (9) Å, $b = 5,9870$ (12) Å, $c = 14,0680$ (3) Å, $\alpha = 86,891$ (3) °, $\beta = 88,630$ (3) ° e $\gamma = 88,288$ (3) ° e $V = 393,07$ Å³ (figura 2a). Ao íon de Cu (II) estão coordenados dois íons cloreto *trans* entre si, assim como duas moléculas do ácido *p*-aminobenzóico em uma geometria quadrática plana distorcida. Ligações de hidrogênio estão presentes entre os átomos de

oxigênio e hidrogênio dos grupos ácidos carboxílicos terminais, fazendo com que a estrutura se estenda infinitamente (figura 2b).

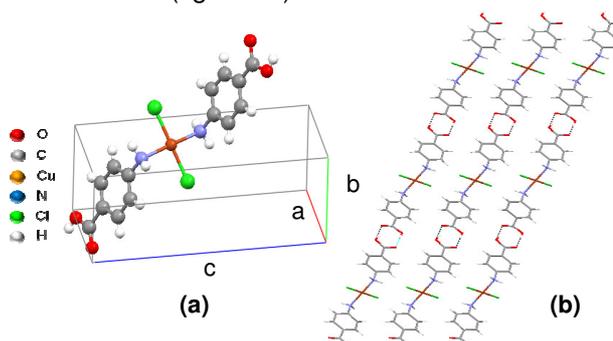


Figura 2. Célula unitária (a) e Ligações de hidrogênio entre os grupos ácido carboxílicos, que resultam em um sistema estendido (b).

Medidas magnéticas foram realizadas e mostraram um acoplamento antiferromagnético entre os íons de Cu(II). Foi possível ajustar os dados magnéticos considerando uma cadeia infinita 1-D de Heisenberg. Entretanto, abaixo de 5 K observou-se um desvio deste modelo, com irreversibilidade magnética e ciclo de histerese na temperatura de 2 K. Isto pode ser explicado pela não colinearidade dos spins dos íons de cobre no estado fundamental, caracterizando o fenômeno chamado de *spin-canting*³.

Conclusões

A construção de estruturas supramoleculares pode ser alcançada através de ligações covalentes e interações intermoleculares, como ligações de hidrogênio. Na estrutura cristalina do composto $[\text{CuCl}_2(\text{C}_7\text{H}_5\text{O}_2\text{NH}_2)_2]$ estas ligações estabelecem um caráter polimérico entre as unidades moleculares. Devido a ausência de um centro de inversão entre os sítios de Cu(II) foi possível fazer relação da estrutura cristalina e propriedades magnéticas e explicar o fenômeno de *spin-canting* observado para o composto.

Agradecimentos

FAPERJ, CNPq, LDRX-UFF e Instituto do Milênio de Nanotecnologia.

¹ Hu, D.H.; *et.al. Polyhedron*, 22, 2003, 2661.

² Aakeröy, C.B.; *et.al. Chem. Commun.*, 2000, 935.

³ Yang, B.; *et.al. Inorg. Chem*, 47, 2008, 1453.