

## Oxidação de dimetil sulfóxido mediada por um diamino complexo de cobre(II)

Rafael A. Allão (PG)<sup>1</sup>, Jackeline S. Martins (IC)<sup>1</sup>, Guilherme P. Guedes (PG)<sup>1</sup>, Antonio S. Florencio (PG)<sup>1</sup>, José Walkimar de M. Carneiro (PQ)<sup>1</sup>, Sauli dos Santos Jr (PQ)<sup>2,3</sup>, Maria G. F. Vaz (PQ)<sup>1</sup>

\*[cambre300@yahoo.com.br](mailto:cambre300@yahoo.com.br).

1- Instituto de Química - Universidade Federal Fluminense, Niterói – RJ, CEP: 24020-141.

2- Universidade Federal do Tocantins, Laboratório de Física, Campus de Palmas, Palmas – TO, CEP: 77020-120

3- Universidade Federal de Goiás, Curso de Física, Campus de Jataí, Jataí – GO, CEP: 75804-120

Palavras Chave: cadeias antiferromagnéticas, cálculos DFT, magnetismo molecular, dimetil sulfóxido

### Introdução

Dimetil sulfóxido (DMSO) é um solvente bastante utilizado devido a sua capacidade de dissolver substâncias polares e apolares. Este solvente também pode atuar como ligante, coordenando-se a metais tanto pelo oxigênio quanto pelo enxofre<sup>1</sup>. Compostos de diferentes dimensionalidades e propriedades magnéticas, contendo o íon cobre (II), foram obtidos utilizando DMSO<sup>2</sup>. Entretanto, a possibilidade de se gerar produtos indesejados pela oxidação deste solvente quando este é utilizado na presença de diamino complexos de cobre ainda não havia sido relatada<sup>3</sup>. Neste trabalho, mostramos a síntese, caracterização e cálculos DFT para o complexo  $[\text{Cu}(\text{bipy})(\text{H}_2\text{O})_2(\text{SO}_4)]_n$ , obtido pela oxidação de DMSO.

### Resultados e Discussão

Através da reação entre o bloco construtor  $[\text{Cu}(\text{bipy})\text{Cl}_2]$  e DMSO, em condições aeróbicas, foi sintetizado o complexo  $[\text{Cu}(\text{bipy})(\text{H}_2\text{O})_2(\text{SO}_4)]_n$ , posteriormente caracterizado por espectroscopia de absorção na região do infravermelho e análise elementar. As principais bandas de absorção e suas respectivas atribuições em  $\text{cm}^{-1}$  são: 3435  $\nu_{\text{O-H}}$ , 3107  $\nu_{\text{C-H}}$ , 1601  $\nu_{\text{C=C}}$  e 1113  $\nu_{\text{S-O}}$ . Os resultados da análise elementar obtido e (calculado) para este composto de fórmula molecular  $\text{C}_{10}\text{H}_{12}\text{N}_2\text{O}_6\text{SCu}$  foram: % C = 34,53 (34,52), % H = 3,51 (3,52) e % N = 8,06 (8,22). Foram obtidos monocristais de cor azul que permitiram a determinação da estrutura cristalina do composto por difração de raios X em monocristal. No complexo o íon cobre (II) está em um ambiente octaédrico distorcido, coordenado aos nitrogênios da diamina e a duas moléculas de água nas posições equatoriais. Os íons sulfato, que ocupam as posições axiais, fazem ponte entre dois íons de cobre distintos formando um composto na forma de cadeias. Estas cadeias são conectadas por ligações de hidrogênio.

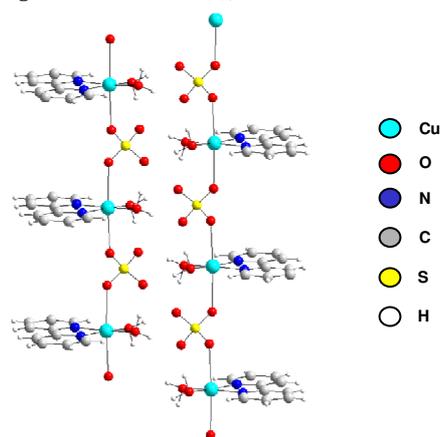


Figura 1. Estrutura cristalina do complexo  $[\text{Cu}(\text{bipy})(\text{H}_2\text{O})_2(\text{SO}_4)]_n$

Medidas magnéticas evidenciaram um acoplamento antiferromagnético entre os íons Cu(II). Foi realizado um ajuste dos dados magnéticos utilizando o modelo de cadeias antiferromagnéticas de Heisenberg, obtendo-se uma constante de acoplamento magnética de  $-0,53 \text{ cm}^{-1}$ . Os cálculos DFT demonstraram que o principal caminho para esta interação antiferromagnética é via ponte sulfato.

### Conclusões

Neste trabalho foi mostrada a formação de um complexo pela oxidação do DMSO, inicialmente usado como solvente. O complexo obtido,  $[\text{Cu}(\text{bipy})(\text{H}_2\text{O})_2(\text{SO}_4)]_n$ , foi caracterizado por difração de raios-x em monocristal e suas propriedades magnéticas foram investigadas. Cálculos DFT foram realizados e permitiram determinar o principal caminho para a interação magnética neste composto.

### Agradecimentos

CAPES, CNPq, FAPERJ e LDRX-UFF.

<sup>1</sup> Calligaris, M, *Coord. Chem. Rev.* **248**, **2004**, 351.

<sup>2</sup> Vaz M.G.F, Pedrosa E.F., Speziali N.L., Novak M.A., Alcantara A.F.C., Stumpf H.O., *Inorg. Chim. Acta* **326**, **2001**, 65

<sup>3</sup> Allão R A., Martins J.S., Guedes G.P., Florencio A.S., Lanznaster M., Santos Jr S., Vaz M.G.F., *Polyhedron* **2009**, artigo aceito para publicação.