

## Síntese e caracterização de complexo trinuclear de Cu(II) contendo ponte do tipo oxamato e bis(2-piridilcarbonil)-amida

Daniella Olandim Reis (IC)\*, Tatiana R. G. Simões (PG), Raquel V. Mambrini (PG), Humberto O. Stumpf (PQ). [dani\\_olandim@hotmail.com](mailto:dani_olandim@hotmail.com)

Departamento de Química, ICEX, UFMG. Av. Antônio Carlos 6627, Pampulha, 31270-901, Belo Horizonte, MG.

Palavras Chave: magnetos moleculares, oxamato, bpca, trinuclear.

### Introdução

A química supramolecular tem sido um dos campos mais rapidamente desenvolvidos na ciência a partir dos anos 90. O desafio é a construção de novas entidades supramoleculares, visando a obtenção de determinada propriedade ou funcionalidade.<sup>1</sup> Magnetos moleculares obtidos através da química supramolecular são sistemas interessantes pois podem apresentar propriedades como relaxação lenta da magnetização, superparamagnetismo e tunelamento quântico.<sup>2</sup>

No presente trabalho, foram realizadas sínteses utilizando estrategicamente complexos como ligante de terminação para obter um aumento controlado do número de íons metálicos na estrutura. Foi sintetizado o trinuclear neutro contendo oxamato  $[\text{Cu}(\text{bpca})_2][\text{Cu}(\text{opba})(\text{H}_2\text{O})]\cdot\text{H}_2\text{O}$ , onde opba = orto-fenilenobis(oxamato) e bpca = bis(2-piridilcarbonil)-amida.

### Resultados e Discussão

Por difusão lenta, em tubo em H, foi adicionado em um lado do tubo uma solução aquosa de  $[\text{Fe}(\text{bpca})\text{Cl}_2(\text{H}_2\text{O})]\cdot(\text{CH}_3)_2\text{CO}$  e, no outro lado, uma solução aquosa de  $(\text{Bu}_4\text{N})_2[\text{Cu}(\text{opba})]$ , na proporção de 2:1. Após vinte dias, ocorreu a difusão completa e houve a formação de cristais azuis, que foram adequados para a realização de difração de raios X de monocristal (Figura 1).

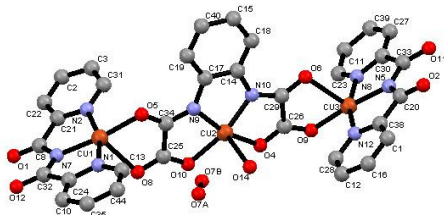


Figura 1. Estrutura do composto  $[\text{Cu}(\text{bpca})_2][\text{Cu}(\text{opba})(\text{H}_2\text{O})]\cdot\text{H}_2\text{O}$

No composto formado,  $[\text{Cu}(\text{bpca})_2][\text{Cu}(\text{opba})(\text{H}_2\text{O})]\cdot\text{H}_2\text{O}$  (**C1**), observou-se a troca do ferro(III) ligado ao bpca pelo íon de cobre(II). Uma nova rota de síntese para a obtenção do mesmo composto foi realizada, porém com a ausência de Fe(III). Em tubo em U, foi adicionado DMSO até preenchimento parcial. Em um lado do tubo, foi adicionada uma solução de

$[\text{Cu}(\text{bpca})(\text{H}_2\text{O})_2]\text{NO}_3\cdot 2\text{H}_2\text{O}$  em etanol e no outro lado, uma solução de  $(\text{Bu}_4\text{N})_2[\text{Cu}(\text{opba})]$  em etanol foi acrescentada, na proporção de 2:1. Após 30 dias, formaram-se microcristais azuis.

O espectro de absorção na região do infravermelho do produto apresentou bandas características dos ligantes:  $\nu(\text{C}=\text{O})$  (bpca)  $1716\text{ cm}^{-1}$ ;  $\nu(\text{C}=\text{O})$  (opba)  $1618$ ;  $\nu(\text{O}-\text{H})$   $3416$ ;  $\nu(\text{C}=\text{C})$  e  $\nu(\text{C}=\text{N})$   $1471, 1447$ ;  $\nu(\text{C}-\text{N})$   $1359$ ;  $\delta(\text{C}=\text{C})$  e  $\delta(\text{C}=\text{N})$   $652, 631$ ;  $\nu(\text{Cu}-\text{N})$   $418$ . Análise elementar [Exp. (calc.)]: C  $41,30$  ( $42,39$ ); H  $2,42$  ( $2,93$ ); N  $11,16$  ( $11,63$ ); Cu  $20,21$  ( $19,79$ ). A partir da curva TG, observou-se a presença de 4 moléculas de água [perda de 7% até  $295^\circ\text{C}$  (calc.  $7,4\%$ )]. As análises levam à proposta da fórmula  $[\text{Cu}(\text{bpca})_2][\text{Cu}(\text{opba})(\text{H}_2\text{O})]\cdot 3\text{H}_2\text{O}$  (**C2**). Foi feita a análise de raios X de pó de **C2** e, comparando-a com a simulação do raios X de pó do monocristal **C1**, é possível confirmar a equivalência dos mesmos (Figura 2).

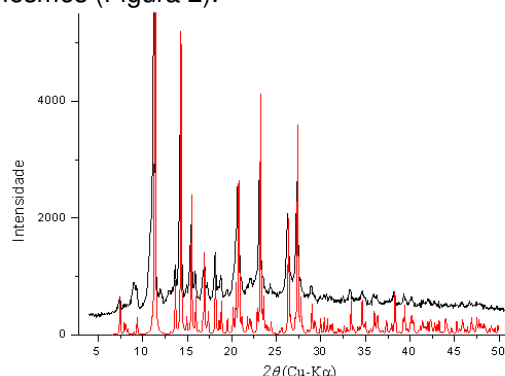


Figura 2. Raios X de pó de **C2** (preto) e simulação do raios X de pó de **C2** (vermelho).

### Conclusões

Foi possível sintetizar, através de uma rota limpa e reprodutível, um trinuclear contendo Cu(II), oxamato e bis(2-piridilcarbonil)-amida. O comportamento magnético do composto ainda está em estudo.

### Agradecimentos

Capes, CNPq, Fapemig

<sup>1</sup> Kane, John J., Nguyen, Tam, Xiao, Jun, Fowler, Frank W. and Lauher, Joseph W. (2001) 'The Host Guest Co-Crystal Approach to Supramolecular Structure', *Molecular Crystals and Liquid Crystals*, 356: 1, 449 — 458

<sup>2</sup> Gatteschi, R. Sessoli, *J. of Mag. and Magnetic Mat.* 2004, 272–276, 1030–1036.