

Síntese, estrutura e investigação das propriedades magnéticas do *cis*-[Co(hfac)₂(PhentNN)₂]

Thomaz A. Costa¹ (PG), Julio C. Rocha^{1,2} (PQ), Karen K. O. Braga¹ (IC), Rafael A. A. Cassaro³ (PG), Maria G. F. Vaz^{*1} (PG)

¹Instituto de Química, Universidade Federal Fluminense

²Instituto de Química, Universidade Tecnológica Federal do Paraná

³Instituto de Química, Universidade Federal do Rio de Janeiro

Palavras Chave: Magnetismo Molecular, Estrutura Cristalina, Propriedades magnéticas, Compostos de Coordenação, Cobalto, Radical nitronil nitróxido

Introdução

Os compostos magnéticos moleculares têm sido amplamente estudados. Dentre eles destacam-se os magnetos de uma molécula, do inglês Single Molecule Magnets (SMMs), que apresentam relaxação lenta da magnetização e podem apresentar ciclos de histerese (Efeito de memória magnética) normalmente em temperaturas menores do que 4,0 K. Esses compostos têm despertado interesse devido ao fato de funcionarem como sistemas modelos para a observação de fenômenos quânticos envolvendo a magnetização, assim como, o seu potencial aplicação na construção de dispositivos de armazenamento de informação de alta densidade¹ e seu potencial uso como spin qubits em computação quântica². Nesse contexto, os compostos mononucleares que possuem alta anisotropia magnética, como os complexos contendo íons de cobalto(II), têm ocupado lugar de destaque³. Coordenar um radical orgânico a um metal pode conferir um forte acoplamento magnético entre eles. Em especial, radicais do tipo nitronil nitróxido (NN) são utilizados devido a estabilidade e a versatilidade na obtenção de diferentes derivados⁴. Neste trabalho será apresentado a síntese, caracterização, estrutura e estudo das propriedades magnéticas do complexo mononuclear *cis*-[Co(hfac)₂(PhentNN)₂], onde *hfac* é o hexafluoroacetilacetato e PhentNN é o radical 9-Fenantrenonitronil-nitróxido.

Resultados e Discussão

A síntese consistiu na reação do complexo precursor, [Co(hfac)₂(H₂O)₂], com o ligante radical *p*-PhentNN. Monocristais azul-escuros com hábito cristalino prismático foram obtidos após dois dias de evaporação lenta do solvente em temperatura ambiente. O complexo obtido foi caracterizado utilizando a espectroscopia de absorção na região do infravermelho (IV). A estrutura cristalina foi resolvida utilizando dados de difração de raios X em monocristal em temperatura ambiente. O composto cristaliza no grupo de espaço *C2/c* e a unidade assimétrica consiste em um íon de cobalto(II)

hexacoordenado por seis átomos de oxigênio, provenientes de dois ligantes *hfac* coordenados de forma bidentada e dois radicais PhentNN coordenados de forma monodentada. Os radicais estão coordenados em posições *cis* (**figura 1**). Medidas de difração de raios-X em policristais foram realizadas, onde foi identificada apenas a fase cristalina da estrutura determinada, indicando boa pureza. As medidas de magnetometria SQUID foram realizadas e as medidas de susceptometria AC serão realizadas para a verificação da existência de relaxação lenta da magnetização.

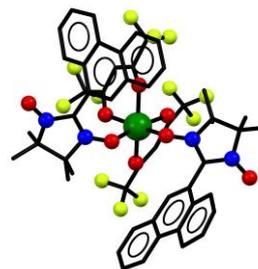


Figura 1. Unidade assimétrica do composto *cis*-[Co(hfac)₂(PhentNN)₂]. Cobalto (verde), oxigênio (vermelho), nitrogênio (azul), carbono (preto) e flúor (amarelo). Os átomos de hidrogênio foram omitidos.

Conclusões

Um novo complexo de cobalto foi obtido. A estrutura cristalina foi determinada e mostra um complexo mononuclear onde íon de cobalto está coordenado a dois radicais do tipo NN.

Agradecimentos

CAPES, FAPERJ, LDRx-UFF

¹ a) Leuenerberger, M. N.; Loss, D. *Nature* **2001**, *410*, 789. b) Garlatti, E.; Guidi, T.; Ansbro, S.; Santini, P.; Amoretti, G.; Ollivier, J.; Mutka, H.; Timco, G.; Vitorica-Yrezabal, I. Whitehead, G. F. S. e Winpenney, R. E. P.; Carretta, S. *Nat. Comm.* **2017**, *8*, 1454.

² Gatteschi, D.; Sessoli, R. e Villain J. *Molecular Nanomagnets*, Oxford University Press, Oxford, U. K. **2006**. b) Moreno-Pineda, E.; Godfrin, C.; Balestro, F.; Wernsdorfer, W. e Ruben, M. *Chem. Soc. Rev.*, **2018**, *47*, 501.

³ R. Boča, *Coord. Chem. Rev.*, **2004**, *248*, 757.

⁴ D. Luneau, *Eur. J. Inorg. Chem.*, **2020**, *7*, 597.