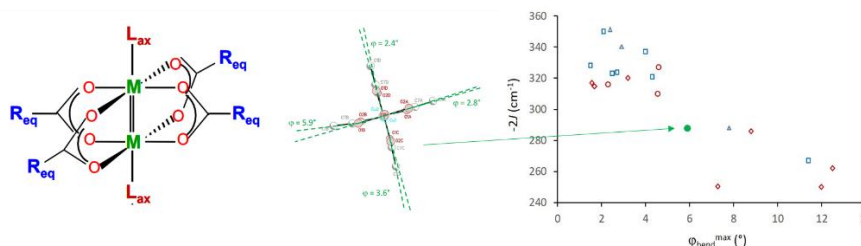


**CORRELACIONES MAGNETO-ESTRUCTURALES EN
CARBOXILATOS DE COBRE****Lautaro Morales,¹ Fabio D. Cukiernik¹**¹ Dto de Química Inorgánica, Analítica y Química Física / INQUIMAE (CONICET-UBA),
FCEN – UBA, Pabellon II, Cdad. Universitaria, C1428EHA CABA, ArgentinaCorreo electrónico de contacto: fabio.cukiernik.inorganica@gmail.com

Los carboxilatos bimetalicos de estructura paddle-wheel $M_2(O_2CR_{ec})_4(L_{ax})_2$ han sido extensamente estudiados, desde el desarrollo del concepto de enlace metal-metal hasta sus aplicaciones en catálisis, química supramolecular y materiales. Los derivados de cobre contribuyeron a la comprensión de las interacciones magnéticas entre centros de spin; más recientemente, se han usado para preparar diversos MOFs.

En cuanto a sus propiedades magnéticas, está establecido que los dos centros de spin $S = \frac{1}{2}$ (Cu^{2+}) interactúan a través de los ligandos ecuatoriales carboxilato, con constantes de acomplamiento antiferromagnético $-2J$ muy altas (200 – 400 cm^{-1}). Por comparación entre los valores de $2J$ para algunos benzoatos de cobre de estructura cristalina conocida, Kato y cols propusieron [1] que la coplanaridad entre el sistema bimetalico O-Cu-Cu-O y el carboxilato O-C-O determina, a través del solapamiento entre orbitales magnéticos mediado por el puente, la magnitud de $2J$. Más recientemente, mostramos [2] que esa correlación es válida para un conjunto amplio de compuestos e independiente de la naturaleza de L_{ax} ; la correlación de la figura se estableció con el máximo ángulo φ de desviación de la planaridad de cada estructura.

**Figura** - Estructura paddle-wheel (izq); Desviación de la planaridad (centro); Correlación (der)

Con el fin de dilucidar si la dispersión en dicha correlación refleja una contribución secundaria al fenómeno de otros parámetros geométricos que influyan sobre el solapamiento, intentamos afinar la descripción incluyendo todos los ángulos φ presentes en cada estructura, ángulos de torsión O-Cu-Cu-O, etc. Ninguno de ellos mejoró la significativamente la correlación; los análisis sugieren que la dispersión parece deberse a las imprecisiones en los valores de $2J$ provenientes de c/u de los ajustes magnéticos más que a una contribución adicional a la pérdida de solapamiento debida a otros efectos geométricos.

[1] Kawata, T.; Uekusa, H.; Ohba, S.; Furukawa, T.; Tokii, T.; Muto, Y.; Kato, M. *Acta Cryst.* **1992**, B48, 253-261.

[2] Marziali Bermudez, M.; Muller, F.; Baggio, R.; Cukiernik, FD *Acta Cryst.* **2024**, C80, 627-632.