

SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN ESTRUCTURAL DEL COMPUESTO DE COORDINACIÓN $\{Co^{III}_8Dy^{III}_8\}$ ENSAMBLADO POR UN PUENTE $\{Na_6(CH_3COO)_6\}$



Martínez Lara, Funes V. Alejandro y Alborés Pablo

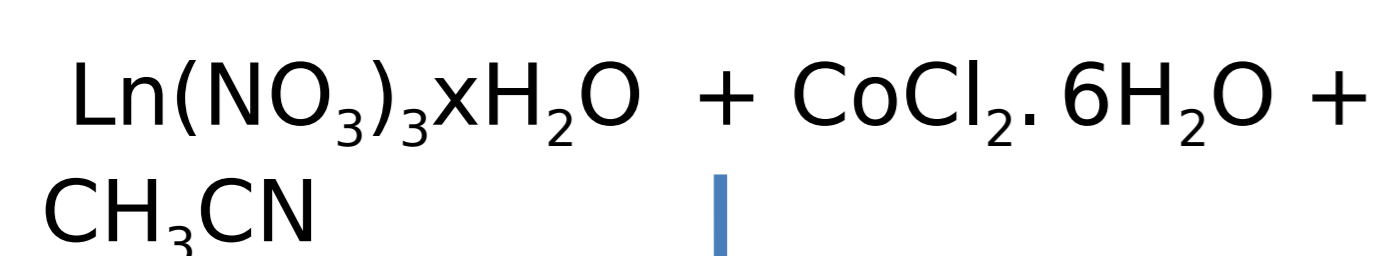
INQUIMAE, Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física, FCEN
 – UBA, Pabellón II, Ciudad Universitaria, Núñez C1428EHA CABA
 laramartinez@qi.fcen.uba.ar; albores@qi.fcen.uba.ar



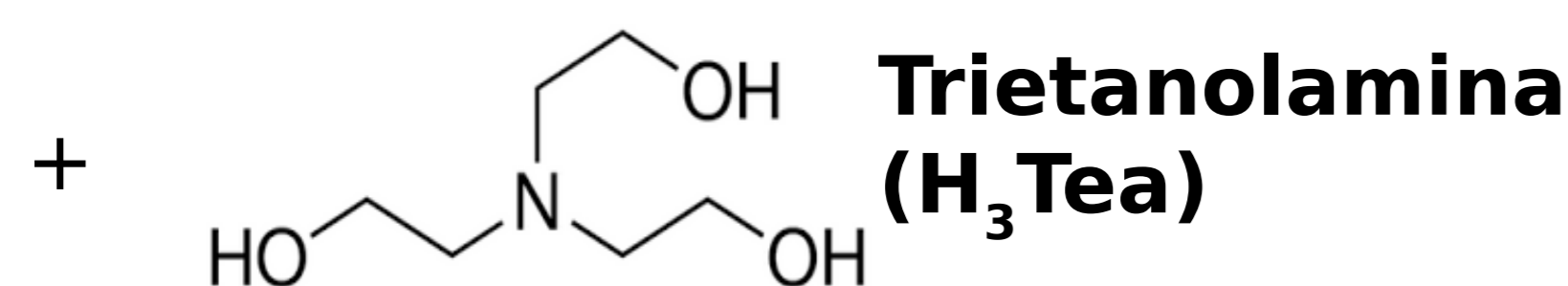
Introducción

En los últimos años se ha observado un rápido y exitoso crecimiento en el campo de los magnetos de molécula única basados en Lantánidos (Ln-SMMs). La estrategia sintética en la búsqueda de compuestos que exhiban mayores temperaturas de bloqueo ha incluido sistemas mononucleares de Lantánidos, polinucleares y compuestos que incluyan además metales 3d. Recientemente se ha reportado un compuesto mononuclear de Dy que presenta apertura del ciclo de histéresis hasta una temperatura de 80 K^{-1} , superior a la temperatura de nitrógeno líquido, generando condiciones más favorables para el diseño de dispositivos tecnológicos en el ámbito de almacenamiento y procesamiento de datos a escala molecular. En este trabajo se buscan formas alternativas sintéticas de preparar compuestos polinucleares que combinen metales 3d y 4f.

Síntesis



Agitación por 10 minutos.



Caracterización Estructural



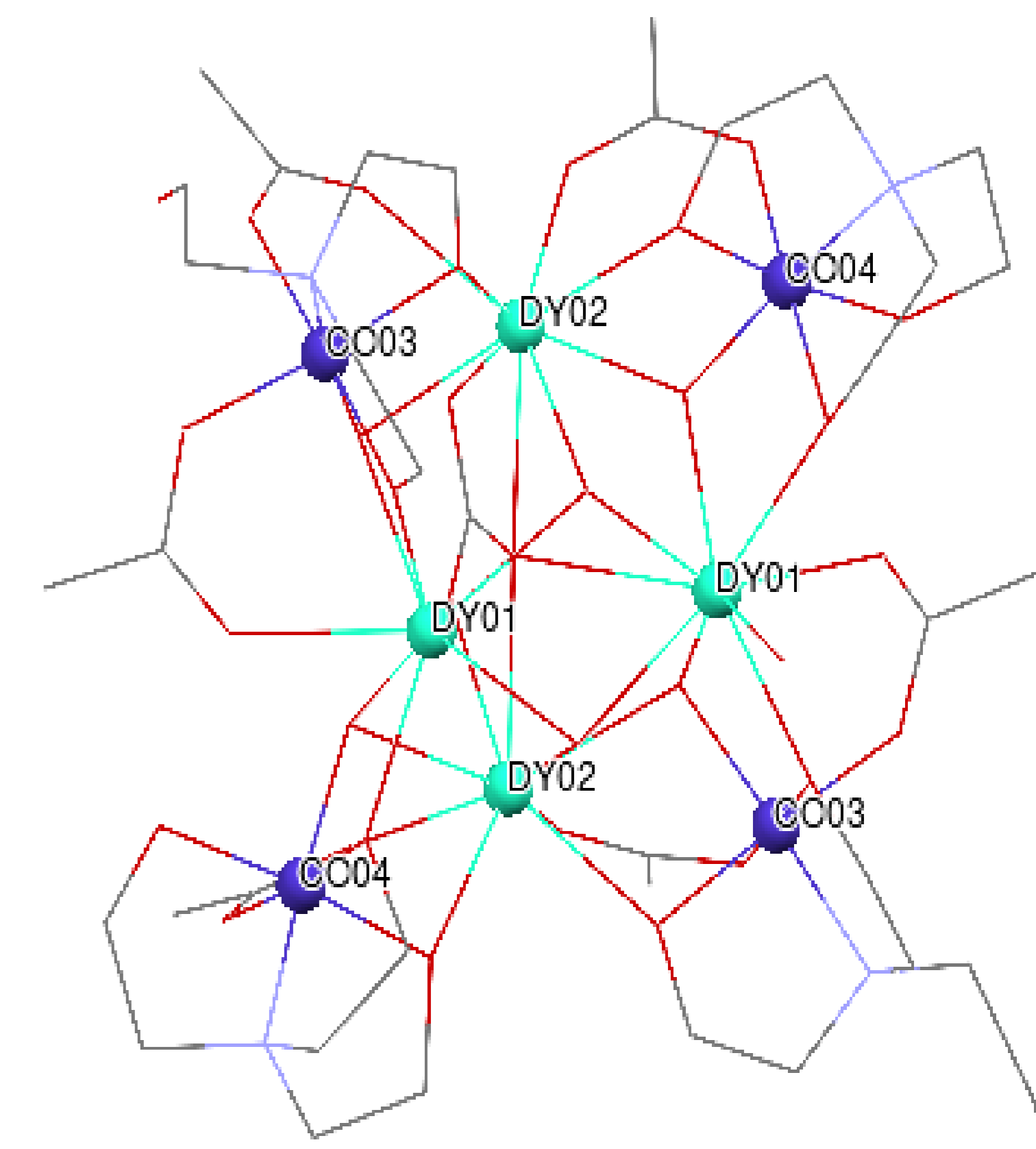
Este nuevo compuesto presenta una estructura compleja formada por dos subunidades, cada una conformada por un centro heterometálico con 4 iones $Co(III)$ y 4 iones $Dy(III)$. Estas subunidades se encuentran conectadas entre sí mediante una estructura tipo paddle-wheel $\{Na_6(CH_3COO)_4\}$.

Los 4 iones $Dy(III)$ se encuentran coordinados por 9 átomos oxígeno cada uno. Se encuentran conectados entre sí mediante 6 puentes hidroxilo, y se observa que uno de los Oxígenos del grupo carbonato además se encuentra unido a los 4 iones $Dy(III)$. Las esferas de coordinación se completan con las uniones con los ligandos TEA y Acetatos. Los iones Co se encuentran en un ambiente de coordinación octaédrico y además de los oxígenos presentan uniones con los Nitrógenos de TEA.

Se observa que el complejo contiene 4 moléculas de Tea^{3-} y 4 $HTea^{2-}$. Estas últimas presentan grupos hidroxilos terminales libres, en posiciones desordenadas debido a la libertad conformacional que le confiere no estar enlazado a un catión.

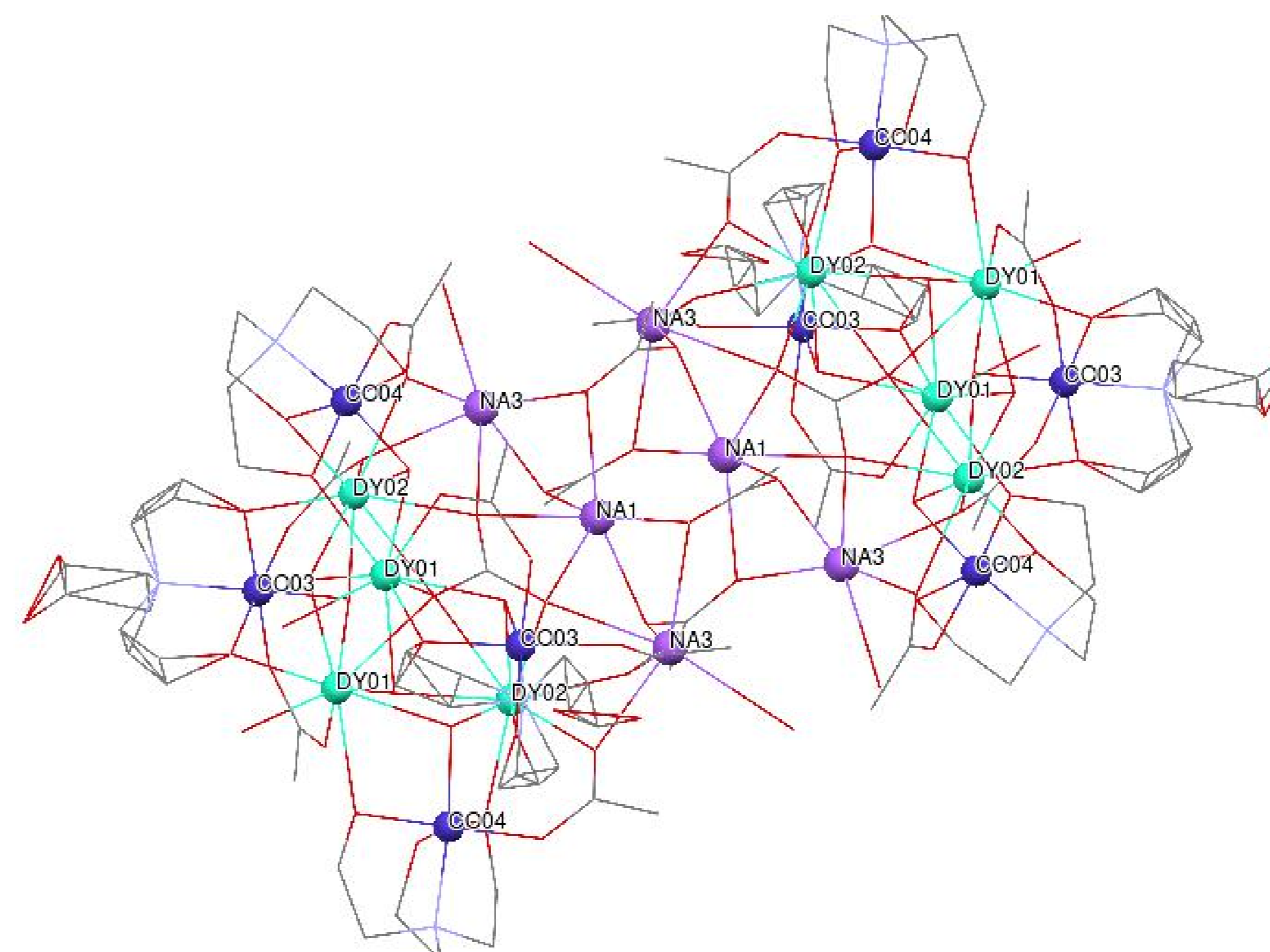
La estructura tipo Paddle-Wheel está formada por 6 cationes Na^+ unidos entre sí por grupos acetatos y carbonatos.

Este compuesto cristaliza en el grupo espacial $I_{2/m}$ se observa un centro de inversión en el centro de la estructura de rueda formada por los cationes Na^+ .



Parámetros Estructurales

Fórmula	$Na_6Dy_8Co_8C_{70}O_{93}N_8H_{193}$
Grupo espacial	$I_{2/m}$
a (Å)	16,1078
b (Å)	23,2004
c (Å)	23,6775
α (°)	90
β (°)	97,908
γ (°)	90
Volumen de celda (Å ³)	8764,3



Conclusiones y perspectivas

A partir de una reacción simple pudo obtenerse un compuesto de coordinación que combina iones $Dy(III)$ con $Co(III)$.

El próximo paso es sintetizar otros compuestos con esta estructura pero cambiando el Lantánido de partida. Debido a la similitud en tamaño y reactividad de los distintos iones lantánidos es posible que manteniendo las condiciones de reacción y cambiando el precursor Lantánido de partida se pueda obtener una familia de compuestos con esta misma estructura.

Lo siguiente sería medir propiedades magnéticas de este compuesto y determinar si presentan comportamiento de magneto de molécula única. Dado que los iones $Co(III)$ son diamagnéticas, las propiedades magnéticas dependerían únicamente de los centros Lantánidos