

SEMINARIO

| | |
|----------------------------------|---|
| Nombre: | Cándida Pastor Ramírez |
| Ultimo grado obtenido: | Maestría |
| Institución: | Instituto de Ciencias |
| Título de la presentación | "Obtención de compuestos de coordinación a partir del poliol (2-((2-hidroxibencilideno)amino)-2-(hidroximetil)propano-1,3-diol) e iones de metales de la primera serie de transición y sus estudios electromagnéticos." |
| Fecha de presentación: | Jueves 30 de octubre de 2019 |
| Hora: | 13:00 hrs. |
| Lugar: | Aula 303 Ecocampus Valsequillo VAL-2 |

Resumen:

En este trabajo se presenta la síntesis, caracterización electrónica, magnética y espacial de cuatro nuevos compuestos [MnII, MnIII2 y MnIV (HL3-)2(H2L2-)2(H2O)4]·(NO3)2·H2O (1), [CuII4(H2L2-)4H2O]·CH3OH (2), [CuII4-m-N3(H2L2-)2(HL3-)H2O]2·CH3CH2OH·9.4H2O (3) y [CuII3(H2L2-)2(m-N3)2] (4) a partir del ligante tripodal (E)-2-((2-hidroxibencilideno)amino)-2-(hidroximetil)propano-1,3-diol (H4L), ligante puente NaN3 y los iones de metales de transición MnII y CuII. Las temperaturas de fusión de 1-4 fueron de 200 a 215 °C con rendimientos de síntesis de ~80 %. Los estudios espectroscópicos de UV-Vis en 1-4 mostraron bandas de $TCL \rightarrow M$, $TCM \rightarrow L$ y bandas anchas de las transiciones $d^{\oplus}d$, éstas dieron información de las geometrías de coordinación alrededor de los iones metálicos en 1-4. En IR se observó un desplazamiento de las bandas características del ligante H4L hacia frecuencias menores principalmente de los enlaces C=N y C-O. Se observó la banda del ligante puente N3- en el caso de 3 y

4, así como la aparición de nuevas bandas de los enlaces Mn–O, Cu–N, Cu–O por la formación de 1-4. Las estructuras cristalinas de 1-3 pertenecen al grupo espacial P-1 y P21/n para 4. El compuesto 1 es un tetrámero de MnII, MnIII y MnIV, 2 un cubano de cuatro iones de CuII, 3 dos unidades de cubanos de cuatro iones de CuII y 4 una estructura polimérica con tres unidades de CuII. Los estudios de magnetización variando la temperatura muestran que 2 y 3 son materiales donde coexisten las interacciones de intercambio ferromagnéticas y antiferromagnéticas entre los iones metálicos con valores de constantes de acoplamiento $J_1 = 102 \text{ cm}^{-1}$ y $J_2 = -117 \text{ cm}^{-1}$; $J_1 = 205 \text{ cm}^{-1}$ y $J_2 = -235 \text{ cm}^{-1}$ respectivamente, esto se puede atribuir a la disposición casi perpendicular de los orbitales magnéticos $d_{x^2-y^2}$ de los centros de Cu(II), 1 y 4 presentan interacciones de superintercambio antiferromagnéticas entre los centros metálicos puenteados por oxígenos y constantes de acoplamiento $J_1 = -164$, -115 cm^{-1} para 1. En RPE los valores de g informaron del estado de oxidación y de espín, así como de la geometría alrededor de los iones metálicos para 1-4, éstos son consistentes con sistemas de espín, $s = 3/2$, $s = 1/2$ y $s = 1$ en 1 y $s = 1/2$ en 2-4. Además, las señales características de desdoblamiento hiperfino para iones de Mn y Cu presentaron valores para 1-4 de $A=96,197,178$ y $161 \times 10^{-4} \text{ cm}^{-1}$, respectivamente. La relación de áreas y la cuantificación del cambio en el ancho de línea dieron información de una población de espines ordenados en contra del campo magnético aplicado y que las interacciones dipolares dominan sobre las de intercambio magnético al bajar la temperatura a 90 K. Los compuestos 1-4 no presentan comportamiento de SMM, sin embargo, las estructuras cristalinas son interesantes ya que no hay muchas reportadas.