

25 de Enero de 2024

12.30 h, Seminario Física Teórica
Facultad de Ciencias

● Polioxovanadatos y Polioxovanadoboratos de valencia mixta. Relación entre estructura y propiedades.



Diego Venegas-Yazigi
Universidad de Santiago de Chile
Centro para el Desarrollo de la Nanociencia y Nanotecnología. Santiago de Chile.

Los polioxovanadatos y polioxovanadoboratos de valencia mixta son una familia derivada de los polioxometalatos que muestran propiedades magnéticas interesantes. Si bien son conocidos hace muchos años, la explicación de sus propiedades magneto-estructurales sigue siendo compleja y en algunos casos aun sin respuesta para los fenómenos observados. En general las medidas magnéticas informadas en la literatura para sistemas de valencia mixta, no considera los entornos de coordinación de los centros paramagnéticos presentes en la molécula. Nos hemos dado cuenta de que es fundamental definir los entornos de coordinación de cada centro paramagnético presente en una misma molécula para poder establecer la relación entre los diferentes estados de oxidación de los centros metálicos en la molécula de valencia mixta. La definición de Robin & Day de los sistemas de valencia mixta ha sido utilizada para clasificar polioxovanadatos con electrones deslocalizados, los que generalmente entran dentro de la Clase II. En los polioxovanadatos y polioxovanadoboratos de valencia mixta, la comunicación entre los diferentes centros paramagnéticos ocurre a través de varios puentes, que normalmente son puentes óxido, produciendo intercambio magnético entre varios centros de forma simultánea. Nuestros resultados muestran que en sistemas polioxovanadatos de valencia mixta es posible encontrar más de una clase de centro metálico, según la clasificación de Robin & Day, en una molécula, aun cuando esta definición considera sistemas dinucleares con un solo puente de comunicación electrónica.

En este trabajo mostraremos las propiedades magneto-estructurales de diferentes polioxovanadatos en los cuales algunos de los puentes óxido han sido sustituidos por puentes borato para la familia de los [V₁₂B₁₈O₆₀H₆] o por alcoholes tripodales como los derivados del tris-hidroximetilaminometano para la familia derivada del Lindqvist [V₆O₁₉]. Esto con la finalidad de establecer la importancia del empaquetamiento cristalino de estas moléculas y las relaciones magneto-estructurales de estos sistemas.