



Transiciones estructurales en materiales moleculares cristalinos a bajas temperaturas

René Cabrera¹, Edilso Reguera¹

¹Centro de Investigación en Ciencia Aplicada y Tecnología Avanzada del Instituto Politécnico Nacional,
Legaria 694. Colonia Irrigación, 11500 México D. F.

Resumen

El Proyecto de Tesis de Maestría comprende el estudio de transiciones estructurales en materiales moleculares bajo condiciones criogénicas (bajas temperaturas: 10-273 K). Los materiales moleculares se caracterizan por tener un enrejado cristalino relativamente flexible donde variaciones de temperatura y factores externos como presión, potencial químico de especies que pueden ser adsorbidas en su superficie, luz, etc. pueden inducir transiciones electrónicas y estructurales. Ese tipo de transiciones serán objeto de estudio en el presente Proyecto empleando para ello datos de difracción de rayos X (DRX) complementados con información espectroscópica y de propiedades físicas.

Introducción

Los materiales moleculares objeto de estudio en este Proyecto están formados por moléculas individuales o bloques moleculares, neutros o iónicos, que se unen entre sí por enlaces relativamente fuertes, covalentes o iónicos, generalmente utilizando como elemento ensamblador un ión metálico. El enrejado de estos materiales puede considerarse también como ligandos, muchas veces de naturaleza orgánica que sirve de puente entre centros metálicos. Las posibles transiciones estructurales en estos enrejados están determinadas, en gran medida, por la rigidez de los grupos puentes y por posibles cambios en la configuración electrónica de los metales y/o ligandos al variar la temperatura y frente a diferentes agentes externos. Así, por ejemplo, si el grupo puente esta formado por una molécula que puede rotar, a partir de cierta temperatura la energía térmica, kT , puede ser suficiente para activar sus estados rotacionales [1]. Otro ejemplo lo tenemos en complejos de coordinación de Fe (2+) en los cuales al disminuir la energía térmica kT se puede favorecer una transición de alto a bajo espín y con ellos pasar de un estado paramagnético a otro diamagnético [2]. La relación de ejemplos particulares puede ser muy grande. Este Proyecto prestará especial atención a dos tipos de transiciones: a) aquellas que ocurren en materiales nanoporosos al variar la temperatura, la presión y las especies adsorbidas en sus cavidades [3]; b) las que tienen lugar asociadas a transiciones electrónicas y establecimiento de un orden magnético [4]. En todos los casos los datos de DRX policristalino se complementarán con espectros Raman, mediciones magnéticas, de adsorción de gases, determinación de calores específicos, variaciones conductividad eléctrica, etc. también a bajas temperaturas.

Procedimiento Experimental

Los datos de DRX se registrarán en un equipo D8 Advance (Bruker) equipado con una cámara de bajas temperaturas ($T > 80$ K), un sistema de generación de haces paralelos y un detector rápido. Cuando se requiera trabajar en la región 10-80 K o en modo de alta resolución se realizarán estancias de medición en el LNLS (Campinas, Brasil). Esta instalación permite, además, trabajar a diferentes energías de los rayos X y con ellos registrar los patrones de difracción tomando en consideración el borde de absorción de los elementos presentes en la muestra. Las mediciones magnéticas a bajas temperaturas, de las propiedades de transporte, etc. se realizarán también en Brasil, en particular en el Laboratorio de Bajas Temperaturas de la Universidad de Campinas.

Análisis de los Datos y Resultados a Obtener

A partir de los datos de DRX se resolverá y refinará la estructura cristalina de todos los materiales a estudiar, utilizando para ello los métodos propios de la Cristalografía, tanto en policristales como en monocristales. La información complementaria disponible servirá para incorporarla a la resolución y refinamiento de la estructura como información *a priori*, y/o para validar los resultados del estudio estructural. En el trabajo con policristales la interpretación de datos inicia indexando las posiciones de Bragg mediante bases de datos que pueden ayudar en la identificación de fases, estas contienen parámetros de celda, intensidades integradas, grupo espacial, prosiguiendo a la resolución de la estructura mediante método de Patterson y métodos directos, así como el refinamiento a través de síntesis de Fourier y método de Rietveld. Como resultados del Proyecto de Tesis deben publicarse al menos dos artículos en revistas internacionales (ISI).

Referencias

- [1] J. Rodríguez-Hernández, Lemus-Santana, J. Ortiz-López, S. Jiménez-Sandoval, E. Reguera, *J. Solid State Chem.* 183(2010) 105-113
- [2] R. Martinez-Garcia, M. Knobel, E. Reguera; *J. Phys. Chem. B*, 110 (2006) 7296-7303
- [3] M. Ávila, L. Reguera, J. Rodríguez-Hernández, J. Balmaseda, E. Reguera. *J. Solid State Chem.* 181 (2008) 2899-2907
- [4] R. Martinez-Garcia, M. Knobel, E. Reguera, *J. Phys.: Condensed Matter*, 18 (2006) 11243-11254