

Tesi doctoral presentada per En/Na

Marta ESTRADER BOFARULL

amb el títol

**"Compostos moleculars d'ions del bloc *f* i *d*:
Estudi del comportament magnètic"**

per a l'obtenció del títol de Doctor/a en

QUÍMICA

Barcelona, 20 de juny de 2008

Facultat de Química
Departament de Química Inorgànica



UNIVERSITAT DE BARCELONA



CONTINGUTS

CAPÍTOL I

Introducció

1. BREU INTRODUCCIÓ AL MAGNETISME MOLECULAR	3
1.1. Propietats magnètiques de la matèria	3
1.2. El paràmetre g	5
1.3. Equació de Van Vleck, Llei de Curie i Fórmula de Brillouin	8
1.4. Acoblament magnètic en compostos polinuclears	10
1.5. Materials magnètics	11
1.5.1. Imants de base molecular	12
1.5.2. Imants unimoleculars	13
1.5.3. Imants cadena	15
1.6. Generalitats sobre l'Espectroscòpia de Ressonància Paramagnètica Electrònica (RPE)	16
2. IONS LANTÀNIDS	18
2.1. Propietats generals i aplicacions dels ions lantànids	19
2.2. Propietats magnètiques dels ions lantànid(III)	23
2.2.1. Aproximació de l'ió lliure	23
2.2.2. Teoria del Camp Cristal·lí	27
3. OBJECTIUS DEL TREBALL	29
4. METODOLOGIA D'ESTUDI MAGNÈTIC DELS COMPOSTOS MIXTOS $d-f$ PRESENTATS AL CAPÍTOL II	33
4.1. Descripció del mètode	33
4.2. Antecedents del mètode	35
ABSTRACT (in English)	39

CAPÍTOL II

Compostos mixtos *d-f* amb $[\text{Cr}(\text{CN})_6]^{3-}$

1. INTRODUCCIÓ	47
1.1. Antecedents bibliogràfics	47
2. COMPOSTOS MONODIMENSIONALS AMB 2,2'-BIPIRIDINA	55
2.1. Síntesi	55
2.2. Caracterització dels productes	57
2.2.1. Espectroscòpia d'infraroig	57
2.2.2. Descripció de l'estructura cristal·lina	60
2.3. Estudi del comportament magnètic	74
2.4. Estudi dels compostos $[\text{ErCr}(\text{bpy})_n]$ i $[\text{YbCr}(\text{bpy})_n]$ per Ressonància Paramagnètica Electrònica (RPE)	85
2.4.1. Breu descripció del mètode i estratègia d'estudi	86
2.4.2. Resultats obtinguts	89
3. COMPOSTOS MONODIMENSIONALS I DINUCLEARS AMB <i>N,N'</i>- DIMETILFORMAMIDA	101
3.1. Síntesi	102
3.2. Caracterització dels productes	103
3.2.1. Espectroscòpia d'infraroig	103
3.2.2. Descripció de l'estructura cristal·lina	105
3.2.3. Estudi de la puresa de postres cristal·lines per difracció de raigs X en pols	115
3.3. Estudi del comportament magnètic dels compostos monodimensionals $[\text{NdCr}(\text{dmf})_n]$, $[\text{EuCr}(\text{dmf})_n]$, $[\text{TbCr}(\text{dmf})_n]$, $[\text{HoCr}(\text{dmf})_n]$ i $[\text{YbCr}(\text{dmf})_n]$	119
4. DISCUSSIÓ DELS RESULTATS	127
ABSTRACT and Publication (in English)	133

CAPÍTOL III

Compostos de Cu^{2+} i $\text{Cu}^{2+}\text{-Ln}^{3+}$ amb lligands aminoàcids

1. INTRODUCCIÓ	173
1.1. Antecedents bibliogràfics	174
1.1.1. Compostos de Cu^{2+} amb lligands aminoàcids	174
1.1.2. Compostos de $\text{Cu}^{2+}\text{-Ln}^{3+}$ amb lligands aminoàcids	178
2. COMPOSTOS DE COURE(II) AMB L·LIGANDS AMINOÀCIDS	180
2.1. Síntesi	180
2.2. Caracterització dels productes	181
2.2.1. Espectroscòpia d'infraroig	181
2.2.2. Descripció de l'estructura cristal·lina	184
2.3. Estudi del comportament magnètic	201
2.3.1. Resultats obtinguts	202
2.3.2. Discussió dels obtinguts	209
3. COMPOSTOS DE COURE(II) I LANTÀNIDS(III) AMB L·LIGANDS AMINOÀCIDS	215
3.1. Síntesi	215
3.2. Caracterització dels productes	216
3.2.1. Espectroscòpia d'infraroig	216
3.2.2. Descripció de l'estructura cristal·lina	217
3.3. Estudi del comportament magnètic	228
ABSTRACT and Publication (in English)	234

CAPÍTOL IV

Compostos mixtos *d-f* amb lligand piridiloxima

1. INTRODUCCIÓ	253
1.1. Antecedents bibliogràfics	254
2. SÍNTESI	255
3. CARACTERITZACIÓ DELS PRODUCTES	259
3.1. Espectroscòpia d'infraroig	259
3.2. Descripció de l'estructura cristal·lina	261
4. MESURES MAGNÈTIQUES	271

CAPÍTOL V

Conclusions

CONCLUSIONS	279
CONCLUSIONS (in English)	286
ANNEX 1: Anàlisis elementals	295
ANNEX 2: Dades estructurals	301
ANNEX 3: Tècniques instrumentals	315