

SÍNTESIS Y ESTRUCTURA CRISTALINA DEL $\text{Ba}(\text{NH}_4)_2[\text{Fe}(\text{CN})_6] \cdot 3\text{H}_2\text{O}$

LUCRECIA MEDINA CÓRDOBA¹, GUSTAVO A. ECHEVERRÍA², OSCAR E. PIRO²,
M. INÉS GÓMEZ¹

¹ Instituto de Química Inorgánica, Facultad de Bioquímica, Química y Farmacia, Universidad Nacional de Tucumán, Ayacucho 471, (T4000INI) San Miguel de Tucumán, Argentina. mgomez@fbqf.unt.edu.ar

² Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional de La Plata y IFLP (CONICET, CCT-La Plata), C. C. 67, 1900 La Plata, Argentina.

La capacidad de los grupos ciano para enlazar el centro de varios átomos se aplica en complejos organometálicos y de coordinación para la síntesis de varios supercomplejos o conjuntos moleculares y también en el campo de la química supramolecular para la construcción de varias estructuras 1D, 2D o 3D [1-2]. Estos compuestos son interesantes como intercambiadores de iones, tamices moleculares o materiales para el almacenamiento de gases y como prototipo de los imanes moleculares [3-5]. Asimismo, se ha reportado el uso de cianocomplejos como precursores de catalizadores bimetalicos heterogéneos y homogéneos, polvos nanométricos y fotosensibilizadores [6,7].

En este trabajo se sintetizó, caracterizó y determinó la estructura cristalina del $\text{Ba}(\text{NH}_4)_2[\text{Fe}(\text{CN})_6] \cdot 3\text{H}_2\text{O}$.

La sal mixta de bario se preparó mezclando soluciones de $\text{Na}_4[\text{Fe}(\text{CN})_6] \cdot 10\text{H}_2\text{O}$, NH_4Cl y BaCl_2 . El contenido de agua se determinó por análisis térmico (TGA y DTA). El complejo resultó ser un trihidrato y los grupos funcionales del cianocomplejo fueron identificados por FTIR.

Las medidas de Difracción de rayos X fueron realizadas en un difractor Oxford Xcalibur Gemini, Eos CCD diffractometer con una radiación de grafito monocromada $\text{CoK}\alpha$ ($\lambda=0,71073 \text{ \AA}$). Los datos fueron corregidos empíricamente empleando el método de absorción multiescaneo implementado en CrysAlisPro (CrysAlisPro, Oxford Diffraction Ltd., version 1.171.33.48 (15-09-2009 CrysAlis171.NET).

El $\text{Ba}(\text{NH}_4)_2[\text{Fe}(\text{CN})_6] \cdot 3\text{H}_2\text{O}$ cristaliza en el grupo espacial Pnma con $a= b = 7,3733(2)$, $c= 45,758(2) \text{ \AA}$ y $Z= 6$. El Fe(II) está situado sobre un centro de inversión [distancia de enlace Fe-C entre 1,919(4)-1,939(4) \AA , distancia C-N en el rango de 1,149(5)-1,164(5), y los ángulos de enlace Fe-C-N desde 177,5(3) a 176,6(3) $^\circ$]. El catión $\text{Sr}(\text{II})$ está situado sobre un plano espejo cristalográfico (C_s) coordinado 8 veces en un antiprisma cuadrado Arquimediano, sandwichado entre 2 bases casi cuadradas, rotada 45° una respecto de la otra. Las esquinas a través de la diagonal de cada base cuadrada están ocupadas por moléculas de agua (sobre sitios C_s) y átomos de N de los cianuros.

Referencias bibliográficas

- [1] Iwamoto T (1996) Supramolecular chemistry in cyanometallate systems. In: Lehn JM (ed) Comprehensive supramolecular chemistry. Pergamon, London, **6**, 643.
- [2] Černák J., Orendáč M., Potočňák I., Chomič J., Orendáčová A., Skoršepa J., Feher A. (2002), Coordination Chemistry Reviews **224**, 51.
- [3] Kaye SS, Long JR (2005) J Am Chem Soc **127**:6506.
- [4] S, Arai K, Sato Y, Hashimoto K (2004) Nat Mater **3**:857.
- [5] Martínez-García R, Knobel M, Reguera E (2007) J Phys Condens Matter **18**:11243.
- [6] Brahmi R., Kappenstein C., Černák J., Duprez D., Sadel A. (1999), J. Chim. Phys. **96**, 487.
- [7] Ferrere S (2000) Chem. Mater **12**:1083