

Bi₂Al₄O₉: LA ESTEREOQUÍMICA DEL PAR SOLITARIO DE ELECTRONES DEL BISMUTO Y LAS CONSECUENCIAS EN LA CONDUCTIVIDAD IÓNICA

Mariano Curti¹, David Chame¹, M. Mangir Murshed², Thorsten M. Gesing²,
Cecilia Mendive^{1*}

¹Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad Nacional de Mar del Plata, Dean Funes 3350, 7600 Mar del Plata, Argentina.
Tel. 0054 223 475 6167

²Solid State Chemical Crystallography, Faculty of Chemistry, University of Bremen, Loebener Strasse, NW2 28359 Bremen, Alemania.
Tel. 0049 421 218 63140

*E-mail: cbmendive@mdp.edu.ar

El Bi₂Al₄O₉, de grupo espacial *Pbam*, pertenece a la familia de los compuestos tipo mulita. Estas estructuras se caracterizan por cadenas unidimensionales de octaedros (AlO₆) unidos por las aristas y que se interconectan por una sucesión alternada de unidades de dímeros de tetraedros (Al₂O₇) y de grupos BiO₆. Algo que caracteriza al Bi₂Al₄O₉ es que el par electrónico 6s² del átomo de Bi no se encuentra homogéneamente distribuido alrededor del núcleo atómico sino que se localiza con una orientación dada proyectándose en la red con una intensidad particular (Fig. 1). A esta pérdida de simetría esférica o carácter s se la denomina estereoquímica del par electrónico. Así, el par electrónico de los átomos de Bi en el compuesto Bi₂Al₄O₉ son estereoquímicamente activos.

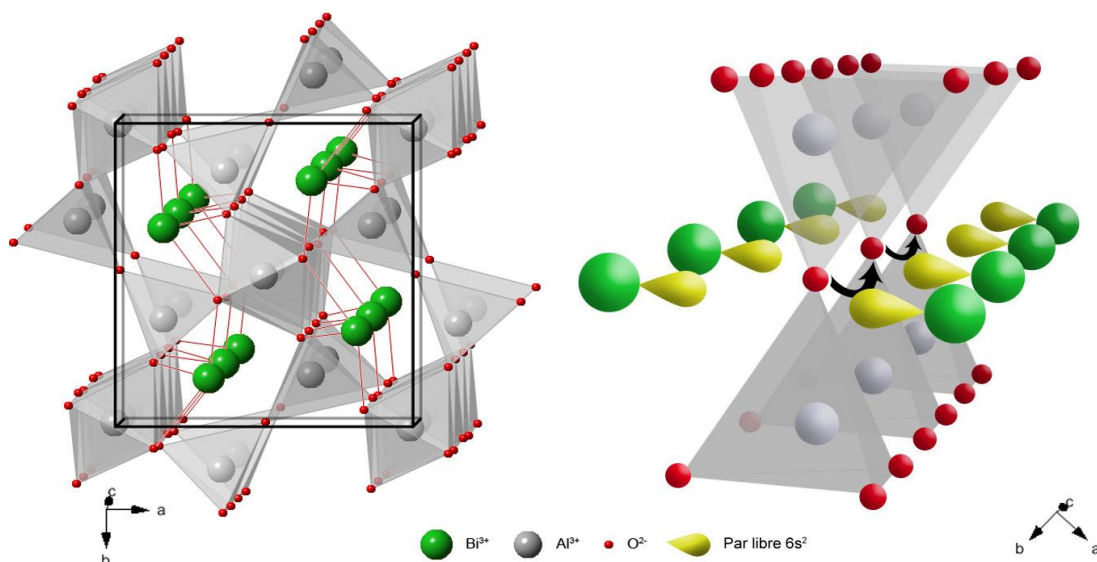


Figura 1 – Estructura del Bi₂Al₄O₉, donde se esquematiza el par solitario de electrones del átomo de Bi y se indica la dirección de conductividad iónica de átomos de O.

El Bi₂Al₄O₉ posee la propiedad de conducción iónica. Un mecanismo posible propuesto por Abrahams et al sugiere la migración concertada de los átomos de oxígeno que unen los dímeros de tetraedros Al₂O₇ (Fig. 1). En este mecanismo, el rol del par solitario de electrones es central ya que su orientación y su protuberancia es clave para facilitar o bloquear el recorrido del oxígeno migrante.

En este trabajo se estudia la estereoquímica del par solitario de electrones en $\text{Bi}_2\text{Al}_4\text{O}_9$ y en estructuras análogas dopadas con Sr^{2+} , empleando la Teoría del Funcional de la Densidad (Density Functional Theory - DFT), de manera de establecer una relación entre la dirección y magnitud de su estereoactividad con la capacidad de conducción iónica del material.

Referencias

- M. Burianek, M. Muehlberg, M. Woll, M. Schmücker, T.M. Gesing, H. Schneider *Cryst Res Technol* **44** (2009) 1156
- I. Bloom, M.C. Hash, J.P. Zebrowski, K.M. Myles, M. Krumpelt *Solid State Ionics* **53–56** (1992) 739
- I. Abrahams, A.J. Bush, G.E. Hawkes, T. Nunes *J Solid State Chem* **147** (1999) 631
- T.M. Gesing, M. Schowalter, C. Weidenthaler, M.M. Murshed, G. Nénert, C.B. Mendive, M. Curti, A. Rosenauer, J.C. Buhl, H. Schneider, R.X. Fischer, *J Mater Chem* (2012) enviado