

138 Estudios teóricos de ligandos y compuestos de coordinación que podrían ser utilizados en trabajos de espintrónica molecular

A. Mella Orellana¹, M. Soler², N. Aliaga Alcalde³, A. Nuñez¹

¹Depto. de Física, Facultad de Ciencias Físicas y Matemáticas,
Universidad de Chile, Av. Blanco Encalada 2008, Santiago, Chile

²Depto. de Ciencia de los Materiales, Facultad de Ciencias Físicas y Matemáticas,
Universidad de Chile, Av. Tupper 2069, Santiago, Chile

³ICREA Research Professor CSIC-ICMAB, Institut de Ciència de Materials de Barcelona,
Universitat Autònoma de Barcelona, Bellaterra, Barcelona, España
andy.mella@u.uchile.cl

Uno de los temas emergentes en nanotecnología es el referido a la espintrónica molecular, que se basa en controlar el espín colectivo de una molécula mediante una corriente polarizada¹. Las moléculas consideradas para este propósito son los “single molecule magnets” (SMMs), que son moléculas que, por su espín intrínseco y la anisotropía molecular, pueden comportarse como imanes moleculares a bajas temperaturas. Debido a sus propiedades, los SMM son considerados para futuras aplicaciones en el almacenamiento de la información y de dispositivos electrónicos^{2,3}.

Una aplicación del manejo del espín da lugar a lo que se conoce como “bits cuánticos” los cuales explotan los estados del espín como superposiciones de 0 y 1 que pueden representar simultáneamente cada número entre 0 y 255. Esto puede dar lugar a una nueva generación de ordenadores y con esto, a la computación cuántica. Para esto uno de los primeros retos a considerar para que los imanes moleculares sean parte de dispositivos electrónicos, es el estudio de la forma con la cual estos serán depositados en superficies, pero más importante aún es conocer detalladamente su estructura, tanto geométrica, como electrónica, para así tener una idea de cómo estas moléculas podrían interactuar con las superficies. En este trabajo, presentamos nuestros resultados de un estudio teórico, basado en un estudio *ab initio*, mediante cálculos de DFT y acopla-

miento molecular, de moléculas que están siendo consideradas, desde un punto de vista experimental, como potenciales imanes moleculares. Si bien, nuestro trabajo tiene como propósito de largo plazo comprender la forma con la que estos SMMs interactúan con superficies metálicas, en esta etapa preliminar reportamos sobre nuestros resultados que involucran moléculas aisladas las cuales presentan enlaces de coordinación con metales, como es posible ver en la **Figura 1** la cual se compone de átomos de cobalto coordinados con ligandos curcuminoides.

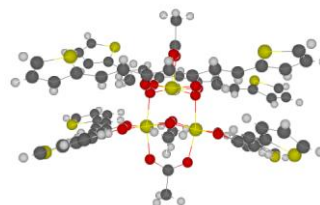


Fig. 1 Compuesto de coordinación formado por ligandos curcuminoides.

Agradecimientos:

Proyecto anillo ACT-1117 “Programa interdisciplinario de nanomateriales y sistemas moleculares”.

Proyecto Fondecyt 1110206

Referencias

- [1] S. Das Sarma, *American Scientist*, **2001**, 89, 516-523.
- [2] W. Wensdorfer, *International Journal Of Nanotechnology*, **2010**, 7, 497-522.
- [3] D. Awschalom, M. Flatté, *Nature Physics*, **2007**, 3, 153-159.