

Metalocinios: nuevas aplicaciones en refrigeración barocalórica

J. García Ben¹, M.A. Señarís Rodríguez¹, S. Castro García¹, M. Sánchez Andújar¹, R. J. C. Dixey², A. Phillips², J.M. Bermúdez García¹

¹ Universidade da Coruña, QUIMOLMAT, Centro de Investigacións Científicas Avanzadas (CICA), Rúa as Carballeiras, 15071, A Coruña, and Departamento de Química, Facultade de Ciencias, Campus da Zapateira, 15008, A Coruña, Spain

² School of Physics and Astronomy, Queen Mary University of London, London, E1 4NS UK.

Durante las últimas décadas los compuestos organometálicos han despertado mucho interés por sus posibles aplicaciones no sólo en el ámbito de la catálisis^[1] sino también en el de biomedicina^[2], dispositivos magnéticos moleculares^[3], etc. Dentro de esta amplia familia de compuestos se encuentran los conocidos como metalocinios: sales de complejos sandwich de fórmula general $[Cp_2M][X]$, Cp: ciclopentadieno (C_5H_5), M: metal de y X: PF_6^- , Cl^- , BF_4^- , etc., Aunque estos compuestos han pasado relativamente más desapercibidos hasta el momento, sí es conocido que la mayoría de ellos presentan comportamiento de cristales plásticos (PC) ya que cuentan con transiciones sólido-sólido entre una fase ordenada y otra altamente desordenada, fenómeno que se produce en a distintas temperaturas dependiendo del metal y del anión^[4].

En este trabajo exploramos la potencialidad de algunos de ellos en un campo nuevo, en el que nunca habían sido estudiados hasta el momento, y que es el de la refrigeración barocalórica en estado sólido, en la que nuestro grupo de investigación trabaja muy activamente en los últimos años. En este contexto conviene señalar que para que un material despierte interés en este campo se necesita que sea muy sensible a la presión hidrostática y que la aplicación de este estímulo induzca una transición sólido-sólido con un gran cambio de entropía isotérmico asociado. Y entre otros parámetros relevantes también debe de presentar una temperatura de trabajo próxima a temperatura ambiente.

Por ello para este estudio seleccionamos como compuestos de partida los metalocinios $[Cp_2M][PF_6]$ (M = Fe, Co), descritos inicialmente por D. Braga *et al.* [5], ya que ambos presentan una transición a PC ligeramente por encima de temperatura ambiente.

La muestra de hierro utilizada es este estudio la sintetizamos en nuestro laboratorio a través de la oxidación del ferroceno, mientras que en el caso de la de cobalto utilizamos una muestra comercial (de Sigma Aldrich). Para evaluar sus propiedades barocalóricas. realizamos estudios en un calorímetro diferencial de barrido aplicando simultáneamente presión (VPDSC). Los dos compuestos mostraron un enorme coeficiente barocalórico, abriendo así nuevos horizontes para esta familia de compuestos en el campo de materiales barocalóricos y sus aplicaciones en refrigeración en estado sólido.

Referencias

- [1] W.A. Herrmann, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2002**, *41*, 1290-1309.
- [2] C.S. Allardyce, A. Dorcier, C. Scolaro, P.J. Dyson, *Appl. Organometal. Chem.* **2005**, *19*, 1-10.
- [3] R. A. Layfield, *Organometallics*, **2014**, *33* (5), 1084-1099.
- [4] H. Kimata, T. Sakurai, H. Ohta, T. Mochida, *ChemistrySelect*, **2019**, *4*, 1410-1415.
- [5] D. Braga, L. Scaccianoce, F. Grepioni, *Organometallics*, **1996**, *15*, 4675-4677.