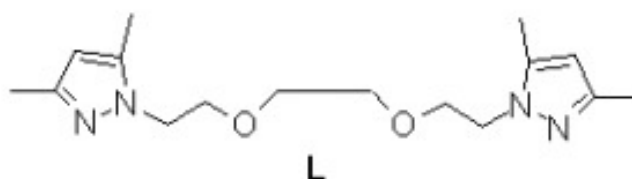


11/2009

Nuevo ligando híbrido de pirazol: más flexible, más versátil



Un compuesto de coordinación está formado por un átomo metálico o ión positivo que se encuentra envuelto de moléculas neutras o iones negativos formando enlaces con él. Las propiedades de los complejos de coordinación están muy relacionadas con los átomos donadores que se coordinan al centro metálico. La capacidad coordinante de los ligandos de pirazol ha hecho que últimamente también se utilicen en la captación y extracción de iones metálicos en soluciones acuosas. El nuevo ligando híbrido pirazólico estudiado en este trabajo es altamente flexible y versátil ya que es capaz de acomodarse a una gran variedad de geometrías, lo que lo convierte en un ligando realmente interesante ya que en un futuro puede tener aplicaciones en catálisis o ser estudiado como modelo en el plegamiento de proteínas.

La química de coordinación es la rama de la química inorgánica que se encarga, entre otros, del estudio de la formación, propiedades y reactividad de los compuestos de coordinación. Un compuesto de coordinación (también conocido como "complejo") está formado por un átomo metálico o un ion positivo que se encuentra rodeado de moléculas neutras o iones negativos formando enlaces con él. Generalmente, el metal suele ser un metal de transición. Las moléculas neutras o iones negativos se denominan ligandos y forman enlaces con el metal a través de sus pares de electrones libres; estos enlaces son covalentes de tipo dativo (aquéllos en los que los dos electrones del enlace provienen de uno sólo de los átomos implicados en el enlace).

Una de las vertientes más interesantes de la química de coordinación es el diseño y la síntesis de ligandos funcionalizados que forman complejos metálicos con propiedades específicas. Estas propiedades están muy relacionadas con los átomos dadores que se coordinan al centro metálico. Si los átomos dadores de un ligando son iguales, se llaman ligandos homofuncionales, mientras que si éstos son diferentes se les denomina ligandos híbridos. Dependiendo de la presencia de un átomo u otro las propiedades y aplicaciones del complejo de coordinación son diferentes.

El diseño de ligandos híbridos, y en particular, los ligandos derivados del pirazol, se utilizan en agroquímica como pesticidas, herbicidas y fertilizantes. En la industria textil los ligandos derivados del pirazol se utilizan como colorantes y en el sector farmacéutico como principios activos o moléculas, con propiedades antitumorales, antioxidantes o antiinflamatorias. La capacidad coordinante de estos ligandos ha hecho que últimamente también se utilicen en la captación y extracción de iones metálicos en soluciones acuosas.

En este artículo se ha descrito la síntesis y caracterización de un nuevo ligando híbrido pirazólico (L) (Figura 1) así como el estudio de su coordinación frente a diversos metales de transición tales como Zn^{II}, Cd^{II}, Hg^{II}, Ni^{II}, Pd^{II} y Pt^{II}. Se ha podido comprobar que este ligando es altamente flexible y versátil puesto que es capaz de acomodarse a una gran variedad de geometrías (tetraédrica, cis y trans-planocuadrada, apical y ecuatorial-octaédrica) y estructuras (polimérica, monomérica y dimérica) (Figura 2). Este hecho es realmente interesante puesto que en un futuro el ligando L puede tener aplicaciones en catálisis o ser estudiado como modelo en el plegamiento de proteínas.

Además, por otro lado, al tratarse de un ligando potencialmente tetradentado y poseer dos átomos de nitrógeno y dos átomos de oxígeno (Figura 1), se ha observado que en estado sólido estos heteroátomos juegan un papel crucial en la formación de enlaces intermoleculares (principalmente enlaces de hidrógeno) provocando así, estructuras tridimensionales de alto interés por sus múltiples aplicaciones. Por ejemplo, recientemente varios complejos pirazólicos están siendo investigados en el campo de la química supramolecular (host-guest).

En consecuencia, la naturaleza híbrida de L junto con su flexibilidad hace que éste pueda ser considerado como un excelente ligando para su uso en la química de coordinación y su posterior aplicación en diversos campos.

Josefina Pons, Miguel Guerrero

josefina.pons@uab.cat, miguel.guerrero@uab.cat

Referencias

"Variable Coordination Behavior of New Hybrid Pyrazole Ligand: Synthesis and Characterization of Several Zn-II, Cd-II, Hg-II, Pd-II, Pt-II, and Ni-II Complexes". Guerrero, M; Pons, J; Parella, T; Font-Bardia, M; Calvet, T; Ros, J. INORGANIC CHEMISTRY, 48 (18): 8736-8750 SEP 21 2009.

[View low-bandwidth version](#)