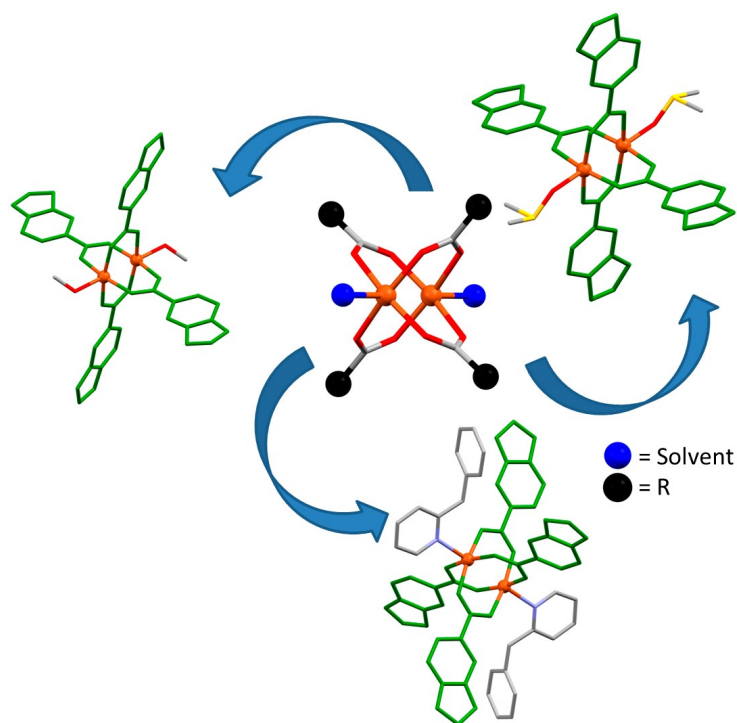


29/01/2020

Caracteritzats tres compostos amb lligands carboxilats de Cu(II)



En el camp de la química supramolecular, la versatilitat dels lligands carboxilats d'alguns compostos de Cu (II) i Zn (II) és una propietat que els permet coordinar i estructurar a si mateixos de maneres distintes, formant xarxes 1D i 2D, i aplicar en diferents àmbits científics. Una de les famílies de compostos carboxilats presenta una estructura “paddle-wheel”, identificada en tres compostos de coure (Cu II) i que la recerca d'un grup de la UAB ha sintetitzat i caracteritzat per mitjà de tres mètodes sintètics diferents.

Esquema de síntesis dels tres compostos

L'estudi de la química pel que fa a la coordinació dels compostos de Coure (II) i Zinc (II) amb

Lligands que contenen grups carboxilats té gran interès atesa la naturalesa làbil i versàtil dels lligands, en tant que aquests compostos són útils en camps com la catàlisi, l'electrònica molecular, el magnetisme i l'emmagatzematge de gasos. A més, els compostos poden presentar diferents modus de coordinació, en aquest cas, enfront el Cu (II) com el monodentat, el quelat i el pont, entre d'altres, i els ions Cu (II) poden presentar diferents nombres de coordinació i geometries, des de la forma tetraèdrica a l'octaèdrica.

Una família important de compostos carboxilats de Cu (II) és la que presenta una estructura "paddle-wheel" o "roda de carro", a causa dels quatre lligands que formen un pont entre dos metalls i pel fet que una de les posicions (apical) de l'entorn d'un metall està ocupada per una altra molècula i no per la roda de carro.

Recentment, el grup "Design of Metal Organic Materials" de la UAB s'ha centrat, d'una banda, en la preparació, síntesi i caracterització de tres compostos amb estructura "paddle-wheel" de Cu (II), un metall amb estat d'oxidació +2. L'inconvenient, però, és que, per a aquest tipus de compostos, no hi ha un mètode estàndard de síntesi, ja que presenten una estructura que els fa útils per ser utilitzats com a productes de partida d'altres compostos, gràcies al nucli que disposen que es manté inalterat després de diferents reaccions. Per aquest motiu, l'estudi presenta tres mètodes sintètics diferents per obtenir compostos amb una estructura "paddle-wheel": tècniques analítiques, espectroscòpiques i per difracció de raig-X en monocristall. D'altra banda, el grup d'investigació ha estudiat l'estructura supramolecular dels compostos amb la finalitat d'analitzar el seu potencial d'aplicació en catàlisi, separació i emmagatzemant de gasos. Finalment, s'ha enregistrat la mesura de l'estabilitat tèrmica (TG/DTA) dels compostos per tal d'indicar fins a quina temperatura els productes són estables, és a dir, a quina temperatura es descomposen i com és aquesta descomposició.

La resolució de l'estructura cristal·lina per difracció de raig-X dels tres compostos confirma que tots tenen quatre lligands carboxilats formant un pont entre els dos àtoms metàl·lics de Cu (II) i l'anàlisi de les estructures supramoleculares d'aquests demostra la formació de xarxes 1D i 2D.

També és interessant l'anàlisi i l'estudi de les estructures supramoleculares formades per interaccions intermoleculares. Concretament, en els tres compostos esmentats, la substitució de les posicions apicals per diferents lligands auxiliars porta a la construcció de diferents interaccions intermoleculares, donant lloc a noves arquitectures.

Josefina Pons

Departament de Química
Universitat Autònoma de Barcelona
Josefina.Pons@uab.cat

Referències

"Synthesis and characterization of three new Cu (II) paddle-wheel compounds with 1,3-benzodioxole-5-carboxylic acid". Francisco Sánchez-Férez, Joan Soldevila-Sanmartín, José A. Ayllón, Teresa Calvet, Mercè Font-Bardía, Josefina Pons, *Polyhedron* 2019, 164, 64-73.

J.M. Rueff, N. Masciocchi, P. Rabu, A. Sironi, A. Skoulios, *Eur. J. Inorg. Chem.* (2001) 2843.
N. Abdullah, Y. Al-Hakem, H. Samsudin, N.S.A. Tajidi, *Asian J. Chem.* 26 (2014) 987.

C.R. Groom, I.J. Bruno, M.P. Lightfoot, S.C. Ward, *Acat Crystallogr. Sect- B Struct. Sci. Cryst. Eng. Mater.* 72 (2016) 171.

M. Guerrero, S. Vázquez, J.A. Ayllón, T. Calvet, M. Font-Bardía, J. Pons, *ChemistrySelect* 2 (2017) 632.

F. Sánchez-Férez, M. Guerrero, J.A. Ayllón, T. Calvet, M. Font-Bardía, J. Giner Planas, J. Pons, *Inorg. Chim. Acta* 487 (2019) 295.

[View low-bandwidth version](#)