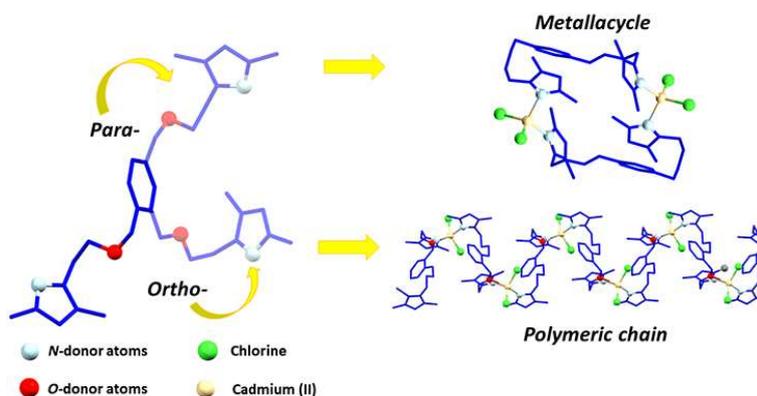


08/10/2020

Dímeros y cadenas poliméricas: efecto de la posición de los grupos funcionales en un ligando heterocíclico



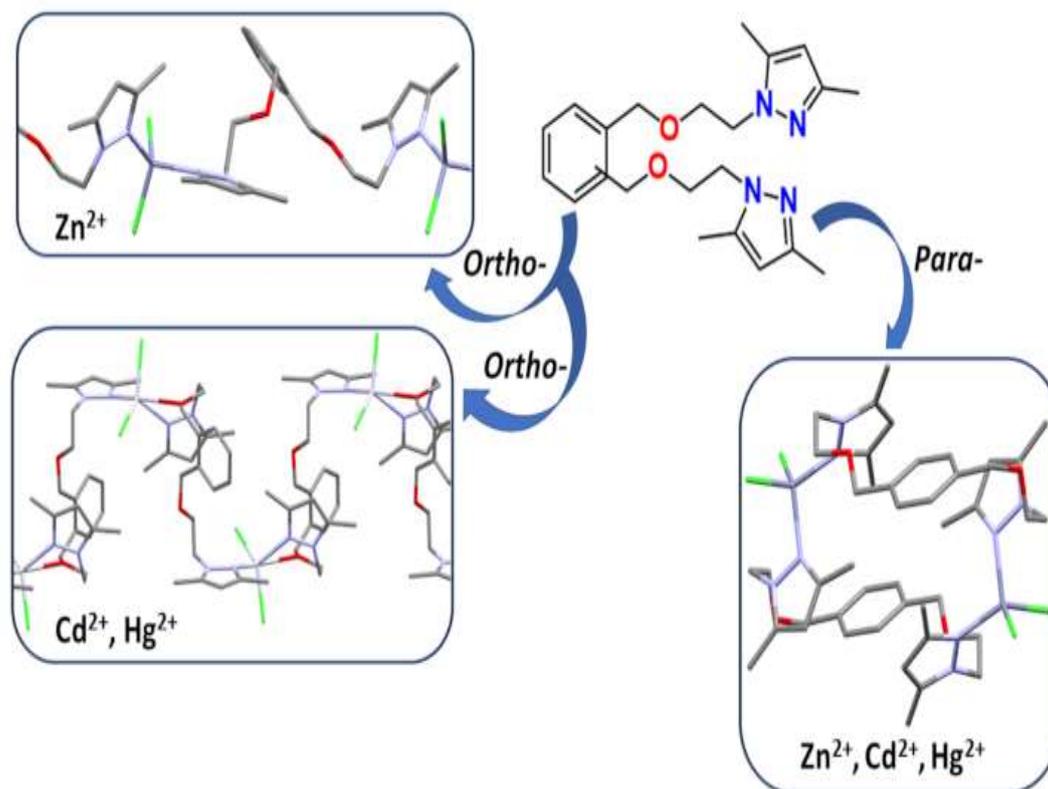
Sintetizar materiales más eficientes y con propiedades diversas es una realidad gracias a la posibilidad de manipular la geometría y estructura molecular de los compuestos. En este artículo, el grupo *Design of metalorganic materials* de la UAB presenta 6 compuestos a partir de los cationes metálicos Zn (II), el Cd (II) y el Hg (II) y de dos ligandos flexibles. Estos ligandos, que también son híbridos, tienen los mismos grupos funcionales, pero están coordinados diferente en el espacio y tienen formas distintas debido a los isómeros empleados *para-* y *orto-*.

Efecto de la sustitución del *orto-* o *para-* en la estructura de los compuestos de coordinación Zn (II), Cd (II) y Hg (II).

La ingeniería cristalina es una rama de la química dedicada al diseño de compuestos de coordinación con estructuras y geometrías controlables, siendo uno de los campos de investigación más activos actualmente¹. Se basa en la combinación de cationes metálicos, los cuales actúan como nodos de la red, y ligandos orgánicos, que unen estos nodos. La modificación de los ligandos permite incidir en el resultado final de la red cristalina².

La búsqueda de materiales más eficientes y con nuevas funciones ha generado un gran interés en la obtención de ligandos flexibles (en contraposición a los ligandos rígidos, investigados anteriormente). En particular, los formados por heterociclos que contienen átomos de nitrógeno. Además, también son de interés los ligandos híbridos, es decir,

aquellos que posean en su estructura átomos donadores diferentes³.



Representación esquemática de los seis compuestos de coordinación resultantes.

En este trabajo, se presentan dos ligandos flexibles formados por grupos heterocíclicos que contienen átomos de nitrógeno (pirazoles) y átomos de oxígeno, los cuales han dado lugar a un ligando híbrido *N,O*. Los dos ligandos sintetizados presentan los mismos grupos funcionales en su estructura, pero se diferencia por su posición relativa al espacio. Así pues, se tienen los isómeros *para-* y *orto-* y se estudia cómo afectan estos cambios posicionales a la estructura de los compuestos obtenidos. Para este estudio se han seleccionado los cationes metálicos Zn(II), Cd(II) y Hg(II).

En total se han obtenido seis compuestos, tres con cada uno de los ligandos. Todos los compuestos han sido caracterizados por técnicas analíticas y espectroscópicas y para todos ellos ha sido posible resolver su estructura cristalina por difracción de rayos X en monocristal.

El estudio permite observar que un pequeño cambio en la posición de los grupos funcionales de los ligandos tiene un efecto enorme en la estructura y propiedades de los compuestos obtenidos. Los tres compuestos obtenidos con el isómero *para-* son dímeros y forman un anillo de treinta y cuatro miembros. Los tres compuestos obtenidos con el isómero *orto-* forman cadenas poliméricas infinitas y se observan diferencias en la coordinación del ligando entre el compuesto de Zn(II) y los de Cd(II) y Hg(II). En el compuesto de Zn(II), el isómero *orto-* sólo se coordina por el nitrógeno, mientras que en los de Cd(II) y Hg(II) también lo hace por el oxígeno. Esta diferencia hace que los compuestos tengan una estructura diferente; el de Zn(II) forma cadenas zig-zag, mientras que los de Cd(II) y Hg(II) forman cadenas en forma de hélice.

Finalmente, también se ha estudiado el comportamiento de los seis compuestos en solución mediante RMN ^1H , RMN ^{13}C , UV-Vis y fotoluminiscencia.

Josefina Pons Picart

Àrea de Química Inorgànica.

Departament de Química.

Universitat Autònoma de Barcelona (UAB).

Josefina.Pons@uab.cat

Referencias

J. Soldevila-Sanmartín, M. Guerrero, D. Choquesillo-Lazarte, J.G. Planas, J. Pons. **Dimeric metallacycles and coordination polymers: Zn(II), Cd(II) and Hg(II) complexes of two positional isomers of a flexible N,O-bispyrazole derived ligand.** *Inorg. Chim. Acta* 506 (2020) 119549. <https://doi.org/10.1016/j.ica.2020.119549>

Referències complementàries

[1] L. Brammer. **Developments in inorganic crystal engineering.** *Chem. Soc. Rev.* 33 (2004) 476–489. <https://doi.org/10.1039/b313412c>.

[2] W. Lu, Z. Wei, Z.Y. Gu, T.F. Liu, J. Park, J. Park, J. Tian, M. Zhang, Q. Zhang, T. Gentle, M. Bosch, H.C. Zhou. **Tuning the structure and function of metal-organic frameworks via linker design.** *Chem. Soc. Rev.* 43 (2014) 5561–5593. <https://doi.org/10.1039/c4cs00003j>.

[3] C. Sanchez, K.J. Shea, S. Kitagawa. **Recent progress in hybrid materials science.** *Chem. Soc. Rev.* 40 (2011) 471. <https://doi.org/10.1039/c1cs90001c>.

[View low-bandwidth version](#)