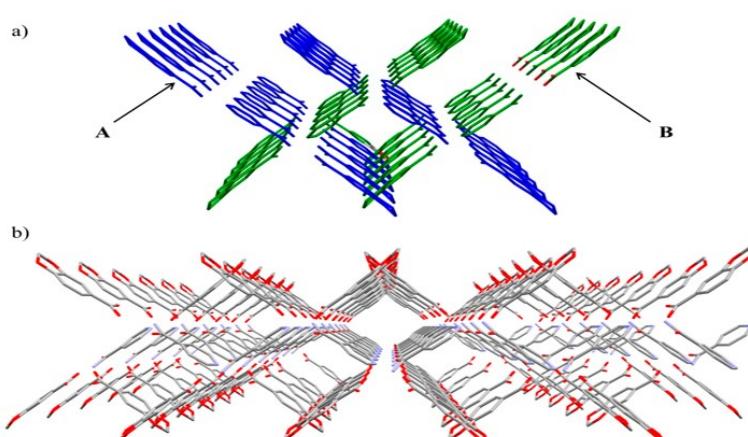


30/03/2020

## Síntesis y caracterización de co-cristal, monómero de Cu(II) y polímero de Cu(II)



En la ciencia de materiales son relevantes los enlaces de hidrógenos, dada su fuerza intermolecular, y las estructuras de co-cristales, a raíz de su versatilidad y poder de transformación física. Estas últimas se forman a partir de los primeros gracias a compuestos como la amina, ahora bien, durante el proceso de formación, la presencia de metales como iones metálicos de Cu (II) abre la pugna para obtener co-cristales, o bien compuestos como monómeros y polímeros, o bien ambos.

Figura 1. Diferentes perspectivas de las cadenas del co-cristal

En cuanto al diseño de nuevos materiales orgánicos e inorgánicos, son de gran interés los que establecen fuerzas intermoleculares por su utilidad como modelos biológicos y en ciencia de materiales. Unas de estas fuerzas intermoleculares son los enlaces de hidrógenos, las características de los cuales son útiles en la ingeniería de cristales.

Los ácidos carboxílicos, formados, en parte, por un grupo carboxilato, pueden formar enlaces de hidrógenos fuertes (OH) cuando se encuentran en presencia de otras moléculas o compuestos orgánicos que tienen grupos NH (aminas, amidas, piridinas) en su estructura. Por un lado, cuando el enlace de hidrógenos se forma directamente entre el O-H del grupo carboxilato y el grupo N-H sin presencia de metales, se forman los co-cristales. La importancia de estos radica

en la capacidad que muestran para modificar propiedades físicas, como el punto de fusión, la solubilidad y la conductividad, entre otros.

Por otra parte, durante la formación de estos compuestos (co-cristales), si hay presencia de iones metálicos como Cu (II), tiene lugar la competición por la formación de co-cristales o complejas, también llamadas compuestos de coordinación. Este es el procedimiento que describe el presente trabajo que, en particular, da a conocer los tres compuestos siguientes: el co-cristal, el monómero de Cu (II) y el polímero de Cu (II). En cuanto al ácido carboxílico, en este caso corresponde al piperonilic (HPip) y la amina es la isocnicotinamida (Isn).

En una síntesis de la investigación objeto de este artículo, se observa la competición de la formación de un co-cristal y un monómero de Cu (II). En otra síntesis; la competición entre la formación de un monómero y un polímero. La investigación expone que se ha podido diseñar una síntesis para obtener el co-cristal y el monómero por separado, pero no ha sido posible encontrar un método de síntesis para aislar sólo el polímero. La separación del polímero de monómero se ha hecho mecánicamente, ya que estos dos productos tienen diferente color, el monómero (violeta) y el polímero (verde). Ambos compuestos se han obtenido en proporción 1.5:1, respectivamente.

Todos los compuestos se han caracterizado por difracción de rayos-X en monocrystal, lo que ha permitido analizar y estudiar las estructuras moleculares y supramoleculares, por espectroscopia IR y también se han realizado análisis elementales. Además, el co-cristal se ha caracterizado por resonancia magnética nuclear de <sup>1</sup>H y <sup>13</sup>C y el monómero y el polímero; por espectroscopia UV-Vis.

Finalmente, para los tres compuestos se han estudiado las superficies de Hirshfeld y se han calculado las energías reticulares. En estos estudios, el valor de la energía reticular calculada es mayor, dado el gran número de interacciones intermoleculares observadas. Se ha demostrado también la gran importancia de la amina en las interacciones intermoleculares (grupo N-H) y la menor importancia del ácido carboxílico (grupo O-H) porque forma interacciones muy débiles (Fuerzas de London).

### **Josefina Pons**

Departamento de Química

Universitat Autònoma de Barcelona

[Josefina.Pons@uab.cat](mailto:Josefina.Pons@uab.cat)

### **Referencias**

**“Isonicotinamide-Based Compounds: From Cocrystal to Polymer”** Francisco Sánchez-Férez, Daniel Ejarque, Teresa Calvet, Mercè Font-Bardía, Josefina Pons, *Molecules*, 2019, 24, 4169

- 1) B.-H. Ye, M.-L. Tong, X.-M. Chen, *Coord. Chem. Rev.* 2005, 249, 545-565.
- 2) A.R. Choudhury, G.R. Desiraju, A.G. Dikundwar, R. Dubey, N. Duggirala, P.P. Ghogale, S. Ghosh, P.K. Goswami, N.R. Goud, R.R.K.R. Jetti, *Cryst. Growth Des.* 2012, 12, 2147-2152.
- 3) F. Sánchez-Férez, M. Guerrero, J.A. Ayllón, T. Calvet, M. Font-Bardía, J. Giner Planas, J. Pons, *Inorg. Chim. Acta* 2019, 487, 295-306.

- 4) J. Soldevila-Sanmartín, J.A. Ayllón, T. Calvet, M. Font-Bardía, C. Domingo, J. Pons, *Inorg. Chem. Commun.* 2016, 71, 90-93.
- 5) A. Mukherjee, *Cryst. Grwth Des.* 2015, 15, 3076-3085.

[View low-bandwidth version](#)