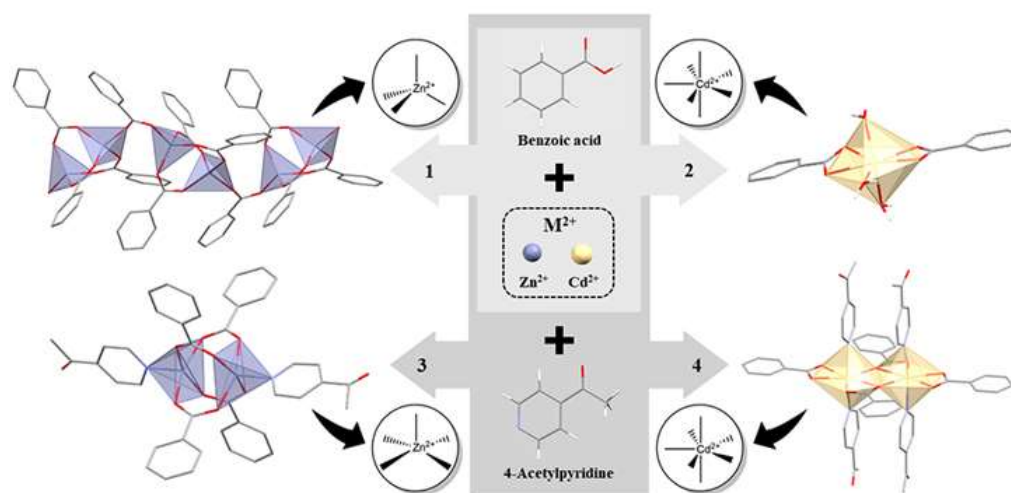


07/01/2021

Obtenció de quatre compostos de zinc(II) i de cadmi(II) obtinguts utilitzant l'àcid benzoic com a lligand



El treball present, emmarcat en la química de coordinació, exposa l'obtenció de 4 compostos de zinc (II) i de cadmi (II) obtinguts a partir de dues reaccions utilitzant l'àcid benzoic. Aquest coordina al metall pel grup carboxilat, i aquests grups presenta diferents modes de coordinació. Les diferents geometries i nombres de coordinació dels materials resultants, segons les particularitats dels dos metalls, formen estructures molt variades i tenen un ampli ventall d'aplicacions i propietats fotoquímiques.

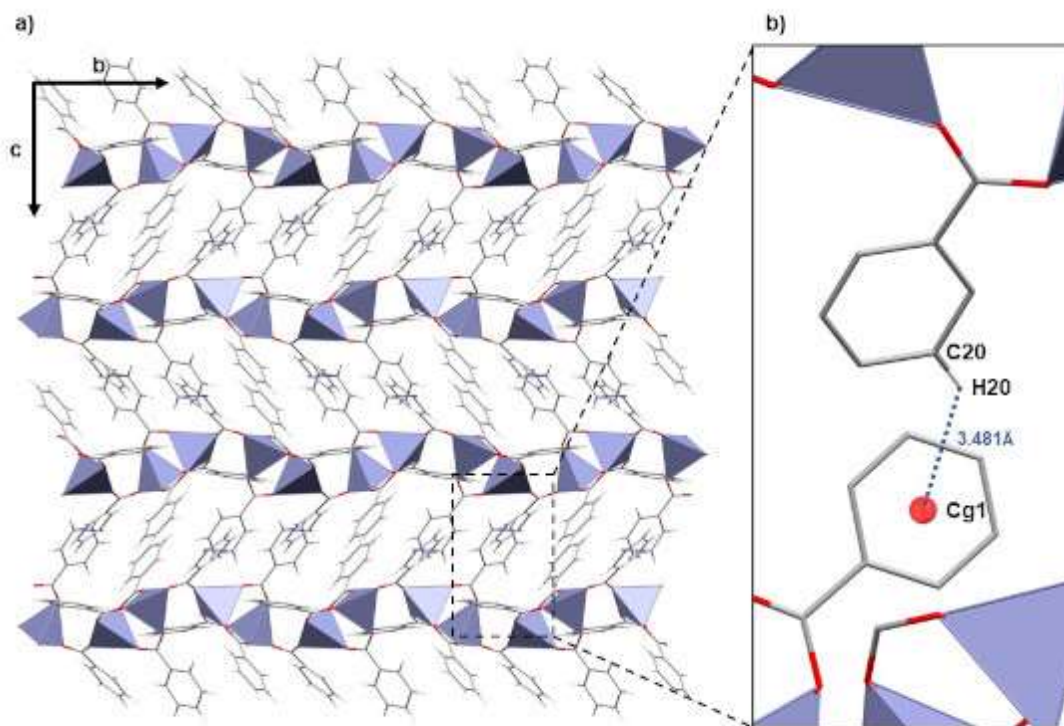
En les últimes dècades dues noves classes de materials metall-orgànics (MOMs), els compostos de coordinació supramoleculars (SCCs) i els polímers de coordinació (CPS), han experimentat un gran avanç en el camp de la Química de Coordinació. Aquests compostos són molt importants no només des del punt de vista estructural, sinó perquè tenen aplicacions en diferents camps, com catàlisi, detecció de gasos o en el camp de la separació química.

En el disseny d'aquests materials es té en compte la geometria del metall, la naturalesa dels lligands, així com les interaccions intermoleculars. A més, s'han de tenir en compte factors addicionals com la relació metall/ligand, els contraions i les molècules de solvent closes.

Una família de lligands utilitzada per dissenyar aquests tipus de materials són els àcids carboxílics, atesa la gran varietat de coordinacions que ofereixen i els compostos mono, di-, tri-, polinuclear i polímers que formen. Un d'aquests lligands és l'àcid benzoic, ja que en les síntesis es pot utilitzar l'aigua com a solvent, el més verd i abundant de tots els dissolvents.

Els metalls del Grup 10 (zinc, cadmi i mercuri) poden presentar una gran varietat de nombres de coordinació i geometries, per tant, presenten una gran diversitat estructural. A més, els compostos de Zn(II) amb lligands carboxilats són molt importants en sistemes biològics i els compostos de Cd(II) presenten unes interessants propietats fotoquímiques i fotocatalítiques.

En aquest treball, es presenta, d'una banda, la reacció de MO (MO = òxid metàl·lic; M = Zn(II), Cd(II)) amb àcid benzoic (HBz) en una mescla d'H₂O/metanol com a solvent i a reflux de la qual s'obtenen els compostos [Zn(Bz)₂]_n i [Cd(Bz)₂(H₂O)₃]. D'altra banda, es va assajar la reacció entre [M(MeCO₂)₂] (M = Zn(II), Cd(II)) amb HBz i una amina (4-acetilpiridina; 4-AcPy) en 1:2:4 relació molar i utilitzant metanol com a dissolvent, de la qual es van obtenir els compostos [Zn(μ-Bz)₂(4-AcPy)]₂ i



Aquests quatre compostos s'han caracteritzat per tècniques analítiques i espectroscòpiques. A més, s'han obtingut cristalls aptes per la seva resolució per difracció de Raig-X en monocristall, que han mostrat la gran diversitat estructural dels compostos obtinguts (polímers de coordinació 1D, monòmer, paddle-wheel i dímer). També s'han obtingut diferents nombres de coordinació i geometries: n° coordinació 4 i geometria tetraèdrica (Zn(II)) i n° coordinació 7 i geometria bipiràmide pentagonal (Cd(II)). En aquests compostos, el lligand benzoat presenta diferents modus de coordinació (bidentat pont, quelat i pont i quelat a la vegada). Pels quatre compostos també s'ha analitzat l'estructura supramolecular de la qual s'ha obtingut la formació de capes 2D i estructures 3D. Finalment, s'han enregistrat i analitzat els espectres UV-Vis i de fluorescència i s'han calculat els rendiments quàntics.

Josefina Pons

Universitat Autònoma de Barcelona.

Departament de Química.

Àrea de Química Inorgànica.

josefina.pons@uab.cat

Referències

Laura Moreno-Gómez, Francisco Sánchez-Férez, Teresa Calvet, Mercè Font-Bardía, Josefina Pons. **Zn(II) and Cd(II) monomer, dimer and polymer compounds coordinated by benzoic acid and 4-acetylpyridine: Synthesis and crystal structures** *Inorganica Chimica Acta*, 2020, 506, <https://doi.org/10.1016/j.ica.2020.119561>