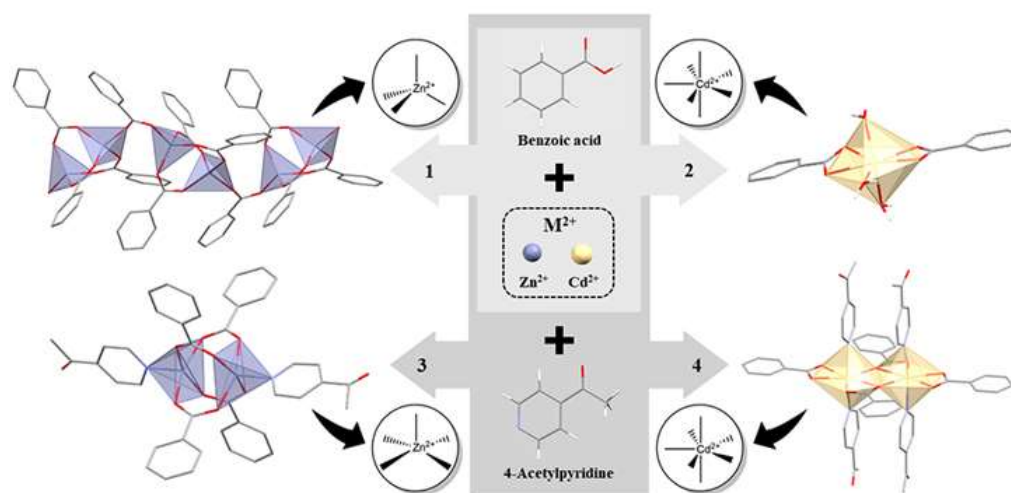


07/01/2021

Obtención de cuatro compuestos de zinc(II) y cadmio(II) obtenidos utilizando ácido benzoico como ligando



El trabajo presente, enmarcado en la química de coordinación, expone la obtención de 4 compuestos de zinc (II) y de cadmio (II), obtenidos a partir de dos reacciones utilizando el ácido benzoico. Éste coordina al metal por el grupo carboxilato, y estos grupos presentan diferentes modos de coordinación. Las diferentes geometrías y números de coordinación de los materiales resultantes, según las particularidades de los dos metales, forman estructuras muy variadas y tienen un amplio abanico de aplicaciones y propiedades fotoquímicas.

En las últimas décadas, dos nuevas clases de materiales metal-orgánicos (MOMs), los compuestos de coordinación supramoleculares (SCCs) y los polímeros de coordinación (CPS), han experimentado un gran avance en el campo de la Química de Coordinación. Estos compuestos son muy importantes no sólo desde el punto de vista estructural sino por su aplicación en diferentes campos, como catálisis, detección de gases o materiales para la separación química.

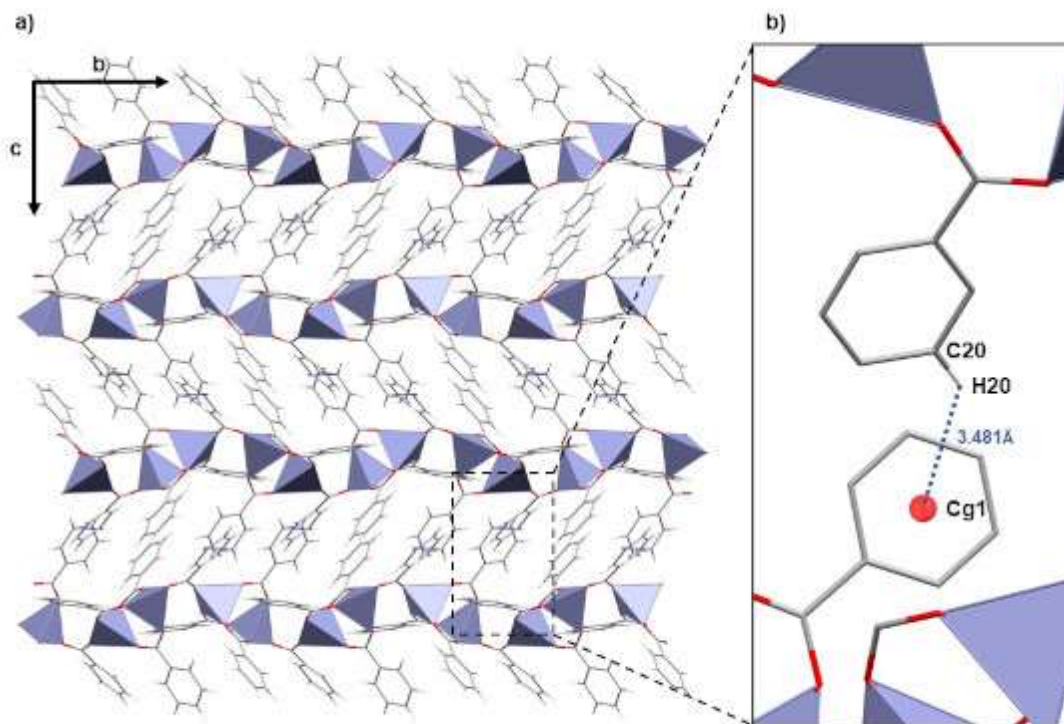
Para el diseño de estos materiales se ha de tener en cuenta la geometría entorno al metal, la naturaleza de los ligandos y también las interacciones intermoleculares. Además, han de tenerse en cuenta factores adicionales como son la relación metal/ligando, los contraiones y las moléculas de disolvente ocluidas.

Una familia de ligandos utilizados para el diseño de este tipo de materiales son los ácidos carboxílicos, debido a que pueden presentar una gran variedad de modos de coordinación y dar lugar a compuestos mono-, di-, tri-, polinuclear y poliméricos. Uno de estos ligandos es el ácido benzoico, ya que en las síntesis puede utilizarse el agua como disolvente, el más verde y barato.

Los metales del Grupo 10 (zinc, cadmio y mercurio) pueden presentar una gran variedad de números de coordinación y geometrías, por tanto, presentan una gran variedad estructural. Además, los complejos de $Zn(II)$ con ligandos carboxilatos son de gran interés en sistemas biológicos y los compuestos de $Cd(II)$ además presentan unas interesantes propiedades fotoquímicas i fotocatalíticas.

En este trabajo, se presenta, por una parte, la reacción de MO (MO = óxido metálico; $M = Zn(II)$, $Cd(II)$) con ácido benzoico (HBz) en una mezcla de H_2O /metanol como disolventes y a reflujo, con los cuales se obtienen los compuestos $[Zn(\mu-Bz)_2]_n$ y $[Cd(Bz)_2(H_2O)_3]$. Por otra parte, se ensayó la reacción entre $M(MeCO_2)_2$ ($M = Zn(II)$, $Cd(II)$) con HBz y una amina (4-

acetilpiridina, 4-AcPy) en 1:2:4 de relación molar y con metanol como disolvente, de la cual se obtuvieron los compuestos $[\text{Zn}(\mu\text{-Bz})_2(4\text{-AcPy})]_2$ y $[\text{Cd}(\mu\text{-Bz})_2(\text{Bz})_2(4\text{-AcPy})_2]_2$.



Los cuatro compuestos se han caracterizado por técnicas analíticas y espectroscópicas. Además, se han obtenido monocristales aptos para su resolución por difracción de Rayos-X en monocristal que han mostrado la gran diversidad estructural de los compuestos obtenidos (polímero de coordinación 1D, monómero, paddle-wheel y dímero). Estos compuestos presentan diferentes números de coordinación y geometrías: nº coordinación 4 y geometría tetraédrica (Zn(II)) y nº de coordinación 7 y geometría bipirámide pentagonal (Cd(II)).

En estos compuestos, el ligando benzoato presenta diferentes modos de coordinación (bidentado puente, quelato y puente y quelato a la vez). Para los cuatro compuestos también se ha analizado la estructura supramolecular obteniéndose capas 2D y estructuras 3D. Finalmente, se han registrado y analizado los espectros UV-Vis y de fluorescencia y se han calculado los rendimientos cuánticos.

Josefina Pons

Universitat Autònoma de Barcelona.

Departamento de Química.

Área de Química Inorgánica.

josefina.pons@uab.cat

Referencias

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>