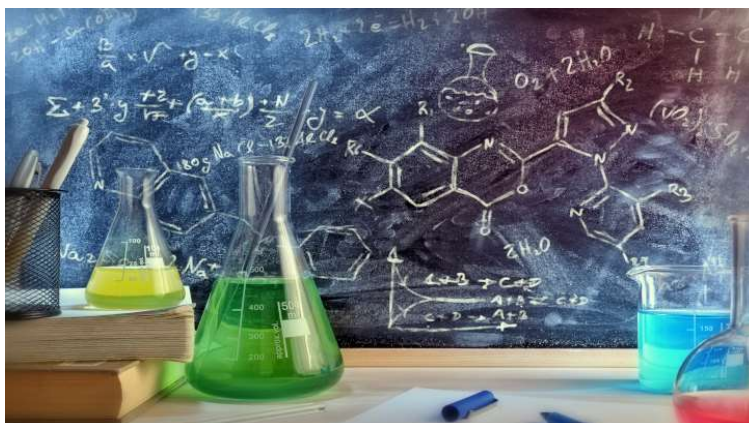


14/05/2021

## Nous compostos amb propietats luminescents interessants



Les propietats fisicoquímiques de les molècules són determinades per una sèrie de factors externs, com la temperatura, o intrínsecs a l'element que la conforma, com el seu nombre atòmic. El resultat final de la conjugació de tots ells és la conformació de molècules amb estructures 1D, 2D, o fins i tot 3D que tindran la seva aplicació en la creació de nous materials, en el camp de la biomedicina, l'agricultura, etc. En aquest article, l'equip de recerca de Josefina Pons explica el procés pel qual han obtingut nous compostos amb estructures moleculars i supramoleculars amb propietats luminescents molt interessants.

iStock-Davizro

La síntesi dels polímers de coordinació (CPs) i complexos de coordinació polinuclears discrets ha estat una àrea de recerca important en les últimes dècades. Aquest tipus de compostos tenen una gran varietat d'aplicacions, catàlisi, separació, emmagatzematge de gasos, magnetisme, sensors, entre altres. En la seva obtenció s'utilitza una metodologia simple en comparació amb les síntesis que s'utilitzen en l'obtenció d'altres tipus de compostos.

Per a estudiar-los, a més dels enllaços de coordinació també s'ha de tenir en compte les interaccions supramoleculars (enllaços d'hidrogen, interaccions C-H $\cdots$  $\pi$  i  $\pi\cdots\pi$ ), ja que determinen l'estructura cristal·lina dels materials. A més, aquestes interaccions febles són determinants de les propietats dels compostos.

Una de les molècules orgàniques que s'utilitzen en l'obtenció d'aquests tipus de compostos són els àcids carboxílics, ja que el grup carboxilat pot presentar una gran varietat de coordinacions i poden formar di-, tri- o tetranuclear metall carboxilats. És de destacar també, altres factors que afecten l'estructura final dels compostos, com els contraions, la relació molar metall:ligand, la temperatura o la polaritat del dissolvent.

Compostos trinuclears amb fórmula  $[M_3(CO_2)_6(L)_n]$  ( $n = 2$  o  $4$ ) es fan servir com a precursors SBUs en la síntesi de MOFs que tenen unes interessants propietats catalítiques, magnètiques i luminescents. A més, moltes vegades els compostos trinuclears tenen molècules de solvent làbils en les posicions laterals, això les fa útils per formar materials 2D o 3D. Un dels trímers més utilitzats són els de zinc. El Zn(II) és un catió  $d^{10}$ , això fa que pugui presentar una gran varietat de geometries i per tant els seus compostos poden presentar una gran versatilitat. Aquestes característiques fa que aquests compostos tinguin unes propietats luminescents i biològiques interessants.

**Figura 1** Estructura molecular del complex: **a)**  $2 \cdot 4CH_3CN$  i **b)**  $3 \cdot 4EtOH$ . **c)**  $N-H \cdots O$  interaccions intramoleculares dels ligandos ACA en  $2 \cdot 4CH_3CN$  i  $3 \cdot 4EtOH$  amb etiquetes assignades per al complex  $3 \cdot 4EtOH$ . El fenilo i altres àtoms que no participen en cap de les interaccions esmentades s'han omès per a major claredat.

#### Molecules

Recentment, el nostre Grup d'Investigació ha estudiat la reactivitat d'un àcid carboxílic (derivat del cinnamic, pOHCinn) amb Cu(II). També s'ha estudiat la reactivitat d'aquest àcid amb Zn(II) i Cd(II) obtenint els compostos  $[M(ACA)_2(H_2O)_2]$ , que s'han fet reaccionar amb 4-fenilpiridina (4-Phpy), observant-se diferents comportaments si el metall és Zn(II) o Cd(II), obtenint el compost monomèric  $[Zn(ACA)_2(4-phpy)_2(H_2O)_2] \cdot 3H_2O$  i el dímer  $[Cd(\mu-ACA)(ACA)(4-Phpy)_2] \cdot 2EtOH$ . Aquests són els primers compostos descrits en la literatura amb aquest lligand.

Com a continuació d'aquest estudi, en aquest treball s'assaja la reacció de  $Zn(OAc)_2 \cdot 2H_2O$  (OAc = acetat) amb alpha-acetamidocinnamic acid (HACA) i 4-Phpy, utilitzant etanol (EtOH) com a dissolvent a temperatura ambient, obtenint un CP,  $[Zn_2(\mu-OO'-ACA)_2(ACA)_2(4-Phpy)_2]_n$  (1). Quan es recristal·litza aquest compost amb acetonitril ( $CH_3CN$ ) o EtOH s'obtenen dos trímers  $[Zn_3(\mu-ACA)_6(4-Phpy)_2]_n$  (2) i  $[Zn_3(\mu-ACA)_6(EtOH)_2]_n \cdot 4EtOH$  (3), respectivament. El compost 2, també s'ha obtingut d'una manera alternativa per reacció entre  $Zn(OAc)_2 \cdot 2H_2O$  amb HACA i 4-Phpy, utilitzant  $CH_3CN$  com a dissolvent i a temperatura ambient.

Aquests compostos han estat caracteritzats per tècniques analítiques i espectroscòpiques. Pels tres compostos ha estat possible resoldre la seva estructura cristal·lina per difracció de raigs-X en monocristall. S'ha estudiat les seves estructures moleculars i supramoleculars, i s'ha observat que els compostos 2 i 3 presenten una estructura supramolecular 2D i pel compost 1 és 3D. Finalment, pels compostos 2 i 3 també s'han analitzat les superfícies de Hirshfeld i s'ha calculat els potencials electroestàtics.

**Josefina Pons**

Universitat Autònoma de Barcelona.  
Departament de Química.

Àrea de Química Inorgànica.

[josefina.pons@uab.cat](mailto:josefina.pons@uab.cat)

### Referències

Ejarque D, Calvet T, Font-Bardía M, Pons J. **Construction of Zn(II) Linear Trinuclear Secondary Building Units from A Coordination Polymer Based on  $\alpha$ -Acetamidocinnamic Acid and 4-Phenylpyridine.** *Molecules*. 2020 Aug 9;25(16):3615. doi: [10.3390/molecules25163615](https://doi.org/10.3390/molecules25163615)

### Altres Referències

- 1) K. Adil, Y. Behmabkhout, R.S. Pillai, A. Cadiau, P.M. Bhatt, A.H. Assen, G. Maurin, M. Eddaoudi, *Chem. Soc. Rev.* 2017, 46, 3402-3430
- 2) G. Minguez Espallargas, E. Coronado, *Chem. Soc. Rev.* 2018, 47, 533-557
- 3) Y.-J. Qi, Y.-J. Wang, X.-X. Li, D. Zhao, Y.-Q. Sun, S.-T. Zheng, *Cryst. Growth Des.* 2018, 18, 7383-7390
- 4) J. Soldevila-Sanmartín, T. Calvet, M. Font-Bardía, C. Domingo, J.A. Ayllón, J. Pons, *Dalton Trans.* 2018, 47, 6479-6493
- 5) D. Ejarque, F. Sánchez-Férez, T. Calvet, M. Font-Bardía, J. Pons, *Inorg. Chim. Acta* 2020, 509, 119695
- 6) G. Chakraborty, S.K. Mandal, *Inorg. Chem.* 2017, 56, 14556-14566

[View low-bandwidth version](#)