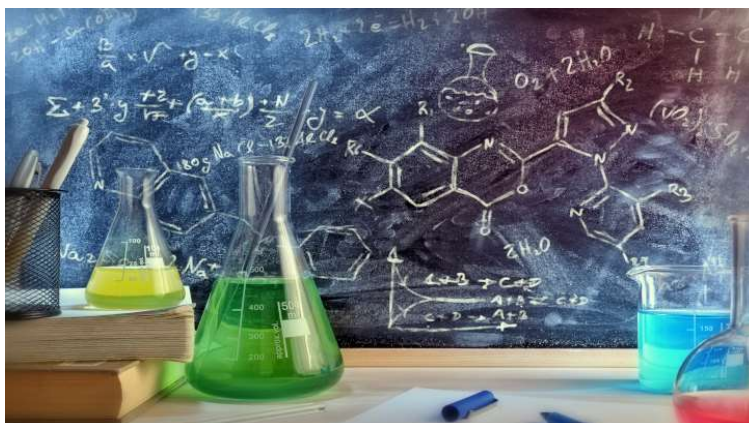


14/05/2021

## Nuevos compuestos con propiedades luminiscentes interesantes



Las propiedades fisico-químicas de las moléculas vienen determinadas por una serie de factores externos, como la temperatura, o intrínsecos al elemento que la conforma, como su número atómico. El resultado final de la conjugación de todos ellos es la conformación de moléculas con estructuras 1D, 2D, o incluso 3D que van a tener su aplicación en la creación de nuevos materiales, en el campo de la biomedicina, la agricultura, etc. En este artículo, el equipo de investigación de Josefina Pons, explica el proceso por el cual han obtenido nuevos compuestos con estructuras moleculares y supramoleculares con propiedades luminiscentes muy interesantes.

iStock-Davizro

La síntesis de polímeros de coordinación (CPs) y complejos de coordinación polinucleares discretos ha sido un área de investigación en las últimas décadas. Estos tipos de compuestos tienen una gran variedad de aplicaciones, catálisis, separación, almacenamiento de gases, magnetismo, sensores, entre otras. Su obtención se basa en una metodología muy simple si se compara con la síntesis de otro tipo de compuestos.

Para estudiarlos, además de los enlaces de coordinación, ha de tenerse en cuenta las interacciones supramoleculares (enlaces de hidrógeno, interacciones C-H $\cdots$  $\pi$ ,  $\pi\cdots\pi$ ) ya que también determinan la estructura cristalina de los materiales, son débiles, pero también determinantes de las propiedades de los compuestos. Una familia de estas moléculas

orgánicas son los ácidos carboxílicos. Su grupo carboxilato puede presentar una gran variedad de coordinaciones capaces de formar di-, tri- o tetranuclear metal carboxilatos. Hay otros factores que también afectan su estructura final, como son los contraiones, la relación molar metal-ligando, la temperatura o la polaridad de los disolventes.

Los compuestos trinucleares con fórmula  $[M_3(CO_2)_6(L)_n]$  ( $n = 2$  o  $4$ ), se utilizan como precursores SBUs en la síntesis de MOFs, que tienen unas interesantes propiedades catalíticas, magnéticas y luminiscentes. Además, la mayoría de las veces estos compuestos tienen moléculas de disolvente lábiles en las posiciones laterales, lo que las hace útiles para obtener materiales 2D y 3D. Uno de los trímeros más utilizados es el de zinc. El Zn(II) es un catión  $d^{10}$ , lo que hace que pueda presentar una gran variedad de geometrías y por tanto sus compuestos pueden presentar una gran versatilidad. Todas estas características hacen que estos compuestos tengan unas propiedades luminiscentes y biológicas interesantes.

**Figura 1** Estructura molecular del complejo: **a)**  $2 \cdot 4CH_3CN$  y **b)**  $3 \cdot 4EtOH$ . **c)**  $N-H \cdots O$  interacciones intramoleculares de los ligandos ACA en  $2 \cdot 4CH_3CN$  y  $3 \cdot 4EtOH$  con etiquetas asignadas para el complejo  $3 \cdot 4EtOH$ . El fenilo y otros átomos que no participan en ninguna de las interacciones mencionadas se han omitido para mayor claridad.

#### Moléculas

Recientemente, nuestro Grupo de Investigación ha estudiado la reactividad de un ácido carboxílico (derivado del cinámico, pOHCinn) con Cu(II). También ha analizado la reactividad de este ligando con Zn(II) y Cd(II), obteniendo compuestos  $[M(ACA)_2(H_2O)_2]$ . Con estos compuestos se ha ensayado la reactividad con 4-fenilpiridina (4-Phpy), observándose diferentes comportamientos según que el catión sea Zn(II) o Cd(II), obteniéndose el compuesto monomérico  $[Zn(ACA)_2(4-Phpy)_2] \cdot 3H_2O$  y el compuesto dimérico  $[Cd(\mu-ACA)(ACA)(4-Phpy)_2]_2 \cdot 2EtOH$ . Estos son los primeros compuestos descritos en la literatura con este ligando.

Como continuación de este estudio, en este trabajo se ha ensayado la reacción de  $Zn(OAc)_2 \cdot 2H_2O$  (OAc = acetato) con alpha-acetamidocinnamic acid (HACA) y 4-Phpy, utilizando EtOH como disolvente y a temperatura ambiente. Se ha obtenido un CP,  $[Zn_2(\mu-OO'-ACA)_2(ACA)_2(4-Phpy)_2]_n$  (1). Cuando se recristaliza este compuesto con acetonitrilo o con etanol se obtienen dos trímeros diferentes  $[Zn_3(\mu-ACA)_6(4-Phpy)_2] \cdot 4CH_3CN$  (2) y  $[Zn_3(\mu-ACA)_6(EtOH)_2] \cdot 4EtOH$  (3). El compuesto 2, también se ha obtenido de una forma alternativa, por reacción entre  $Zn(OAc)_2 \cdot 2H_2O$ , HACA y 4-Phpy utilizando  $CH_3CN$  como disolvente a temperatura ambiente.

Estos compuestos han sido caracterizados con técnicas analíticas y espectroscópicas. Además, para los tres compuestos ha sido posible resolver la estructura cristalina por difracción de rayos-X en monocristal. Se han estudiado las estructuras moleculares y supramoleculares, y se ha observado que los compuestos 2 y 3 presentan una estructura supramolecular 2D y el compuesto 1 una 3D. Finalmente, para los compuestos 2 y 3 también se han analizado las superficies de Hirshfeld y se han calculado los potenciales electrostáticos.

**Josefina Pons**

Universitat Autònoma de Barcelona.  
Departamento de Química.

Àrea de Química Inorgànica.

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

### Referencias

Ejarque D, Calvet T, Font-Bardia 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)

Otras Referencias:

- 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](#)