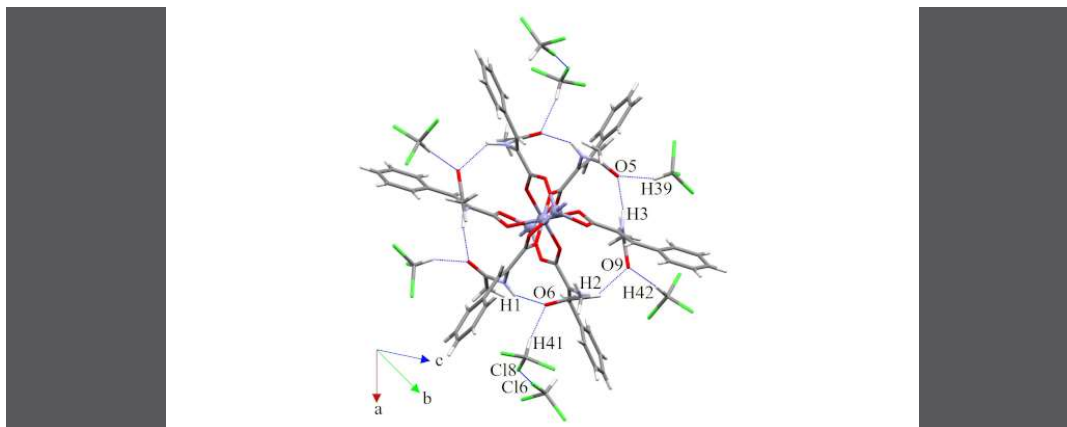


04/10/2022

Obtenció d'estructures diverses amb polímers de coordinació basats en zinc

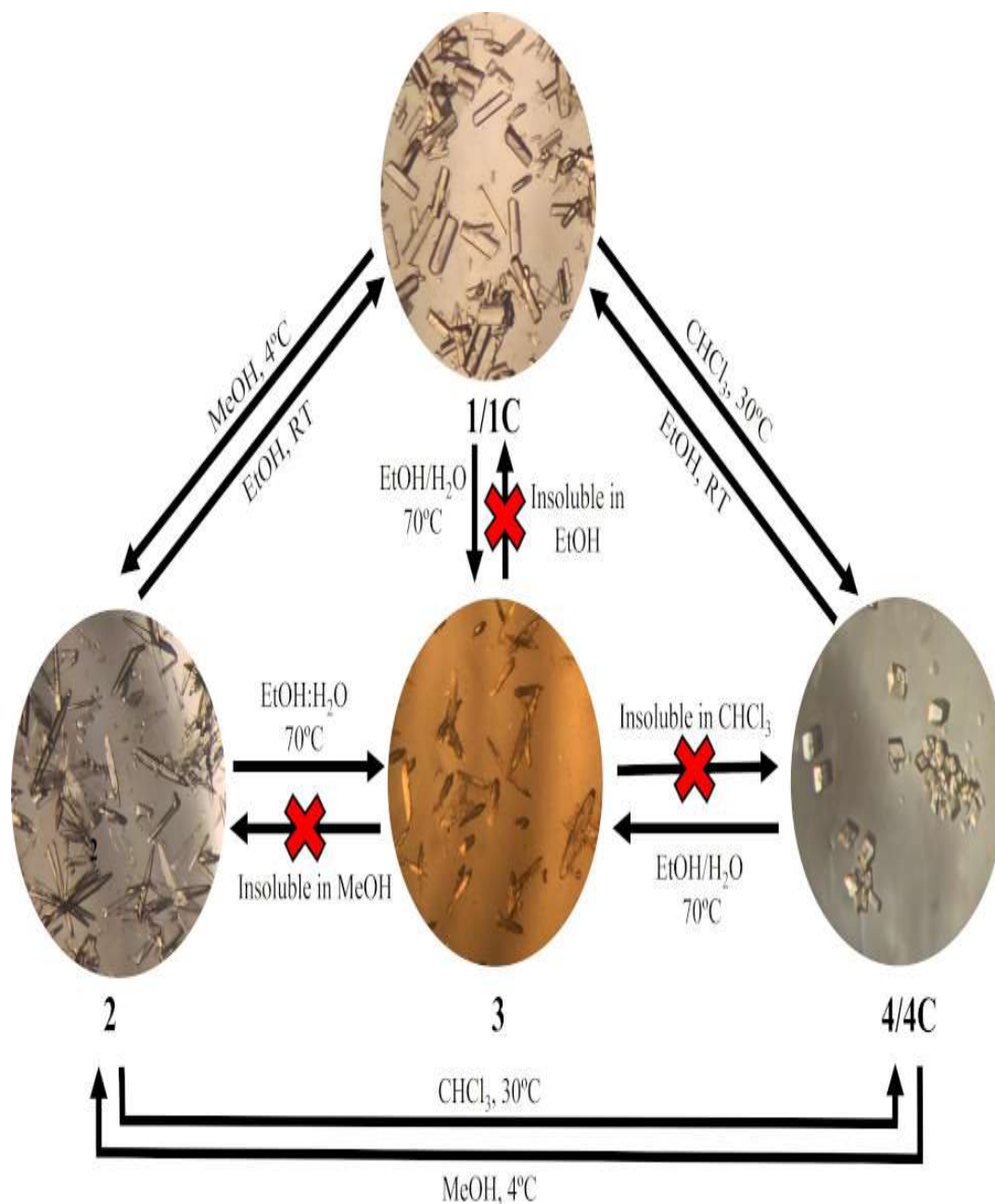


Els polímers de coordinació són compostos de gran interès ja que poden formar estructures molt diverses amb múltiples aplicacions. Investigadors del Departament de Química han caracteritzat i analitzat quatre polímers de coordinació basats en zinc que formen diverses estructures depenent de la temperatura i/o dissolvent utilitzats. Aquests polímers de coordinació presenten diferents propietats luminescents en funció de les seves estructures.

Durant les últimes dècades l'enginyeria de cristalls és un camp interdisciplinari, que té per objectiu la racionalització d'estructures cristal·lines des de els seus assemblatges. En aquest camp, els polímers de coordinació (CPs) han suscitat un enorme interès, no només per la seva gran diversitat estructural sinó també per les seves possibles aplicacions.

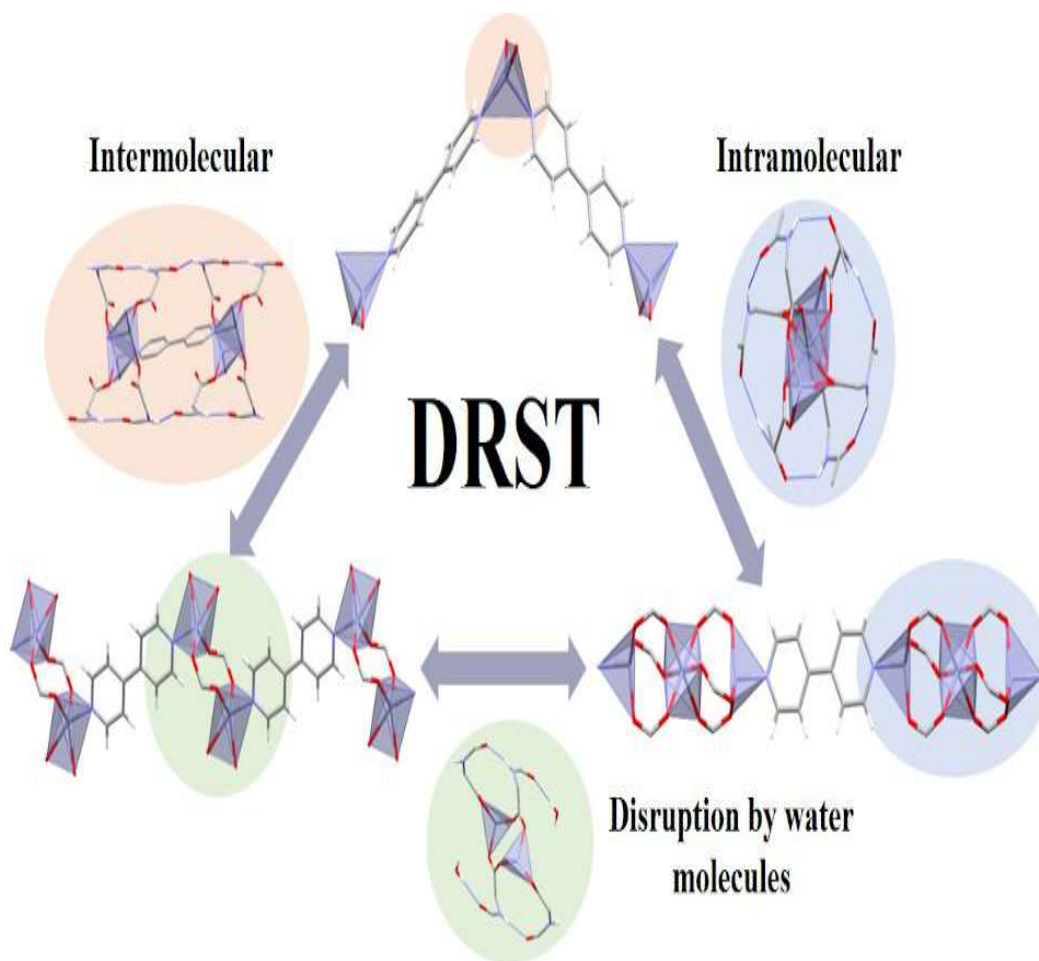
Petits canvis en les condicions sintètiques, sal metàl·lica, relació metall·ligand, temperatura o dissolvents, poden portar a la formació de diferents CPs. Les possibles transformacions estructurals originada per diferents per diferents estímuls externs (dissolvent, llum, calor, efectes sinèrgics) han estat objecte d'una gran atenció obrin el camí per a poder obtenir noves estructures difícils d'obtenir per altres mètodes sintètics.

El comportament dels CPs, quan aquests estan sotmesos a efectes externs, presenta en la actualitat una remarcable atenció, en particular quan s'obtenen diferents estructures i aquestes a més són reversibles.



El nostre grup ha sintetitzat i caracteritzat quatre Zn(II) CPs. La reacció entre $\text{Zn}(\text{OAc})_2$ (OAc = acetat), α -acetoamidocinnámico acid (HACA) and 4,4'-bipiridina (4,4'-bipy) obtenint el compost $\{[\text{Zn}(\text{ACA})_2(4,4'\text{-bipy})]\cdot\text{EtOH}\}_n$ (**1**). Aquests compost és el reactiu que s'ha fet servir per la formació de tres CPs, mitjançant transformacions estructurals dissolució - recristalització (DRSTs).

L'estudi de les quatre estructures cristal·lines revela la formació de diferents unitats secundàries (SBUs), monòmers, dímers i trimers units entre ells per el lligand 4,4'-bipy. L'obtenció d'un o altre compost depèn del dissolvent i/o temperatura. A més, s'ha estudiat la reversibilitat i la conversió entre els quatre CPs i s'ha demostrat que aquestes transformacions són reversibles en la major part dels casos. Finalment, la fotoluminescència en estat sòlid s'ha analitzat i ha evidenciat que l'efecte dels grups amida no només predetermina un diferent SBUs sinó també una diferent emissió d'aquests quatre compostos.



Aquest treball contribueix a entendre la relació entre estructures i propietats en els CPs, i mostra uns exemples de CPs formats amb els mateixos lligands que presenten diferents ordenacions estructurals, el que porta a propietats fotoluminiscentes diferents.

Josefina Pons, Daniel Ejarque
 Departament de Química
 Universitat Autònoma de Barcelona
josefina.pons@uab.cat

Referències

Daniel Ejarque, Teresa Calvet, Mercè Font-Bardía, Josefina Pons, **Amide-Driven Secondary Building Unit Structural Transformations between Zn(II) Coordination Polymers**, *Cryst Growth Des*, 2022, 22, 5012-5026, DOI: [doi.org/10-1021/acs.cgd.2c00520](https://doi.org/10.1021/acs.cgd.2c00520)

Desiraju, G.R. *J. Am. Chem. Soc.* 2013, 135, 9952-9967

Ejarque, D.; Calvet, T.; Font-Bardía, M.; Pons, J. *Molecules* 2020, 25, 3615

Cheng, A. -L.; Ma, Y.; Sun, Q.; Gao, E. -Q, *CrystEngComm* 2011, 13, 2721

Cepeda, J.; Pérez- Yáñez, S.; García, J. A.; Rojas, S.; Rodríguez-Diéguez, A. Dalton Trans. 2021, 50, 9269-9282

[View low-bandwidth version](#)