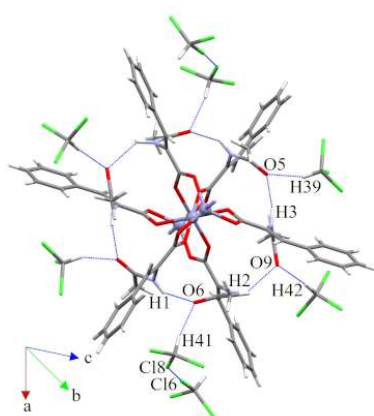


04/10/2022

Obtención de estructuras diversas con polímeros de coordinación basados en zinc



Los polímeros de coordinación son compuestos de gran interés ya que pueden formar estructuras muy diversas con múltiples aplicaciones. Investigadores del Departamento de Química han caracterizado y analizado cuatro polímeros de coordinación basados en zinc que forman diferentes estructuras dependiendo de la temperatura y/o disolventes utilizados. Estos polímeros de coordinación presentan diferentes propiedades luminiscentes dependiendo de sus estructuras.

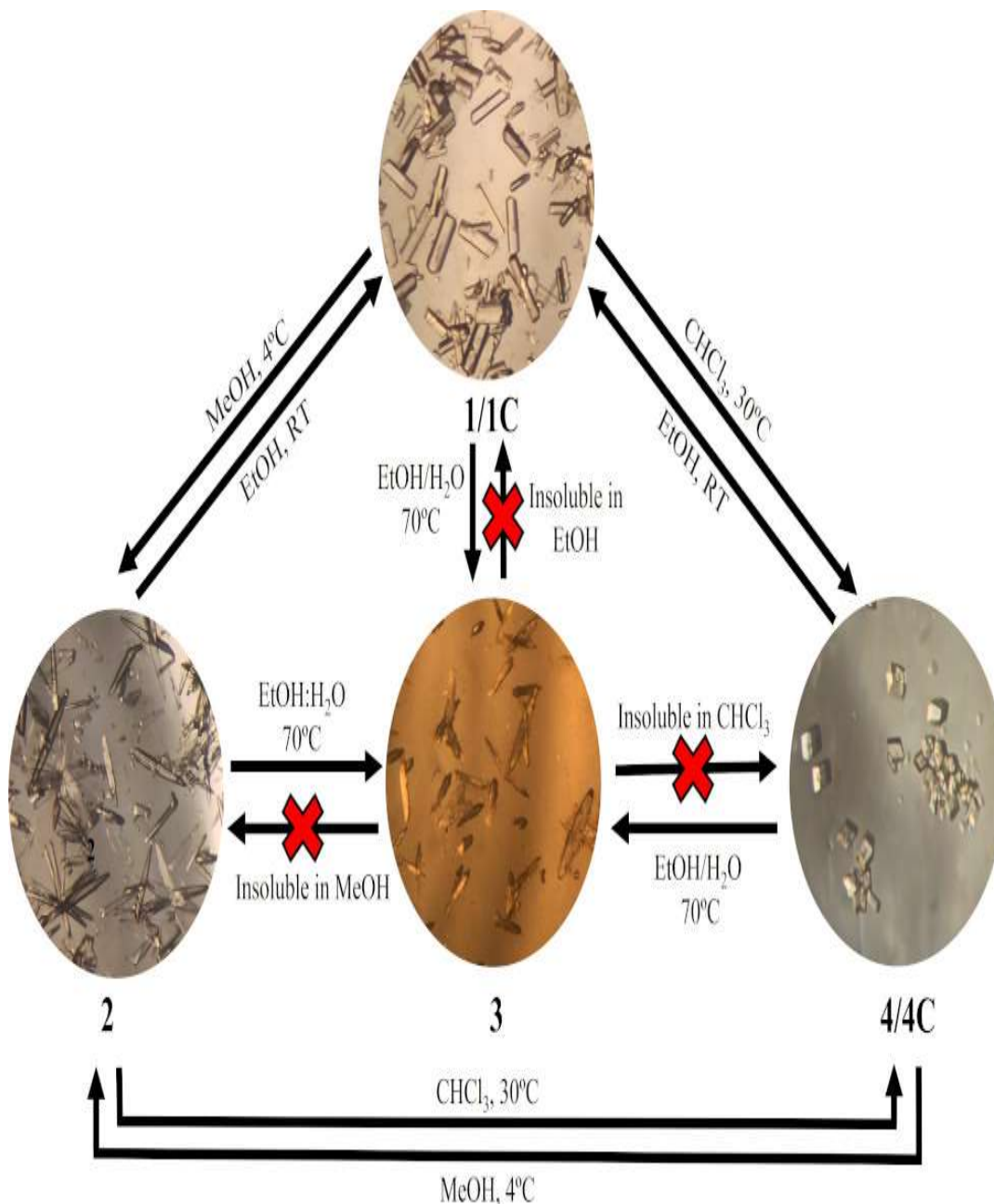
Durante las últimas décadas, la ingeniería de cristales ha surgido como un campo interdisciplinar que se basa en la racionalización de estructuras cristalinas desde sus ensamblajes. En este campo, los polímeros de coordinación (CPs) han suscitado un enorme interés, no sólo por su gran diversidad estructural sino también por sus posibles aplicaciones.

Pequeños cambios en las condiciones sintéticas, sal metálica, relación metal:ligando, temperatura o disolventes pueden llevar a la formación de diferentes CPs. Las posibles transformaciones estructurales originadas por diferentes estímulos externos (disolventes, luz, calor, efectos sinérgicos) han sido objeto de un gran interés, abriendo el camino para la obtención de nuevas estructuras difíciles de obtener por otros métodos sintéticos.

El comportamiento de los CPs, cuando estos se someten a efectos externos, en la

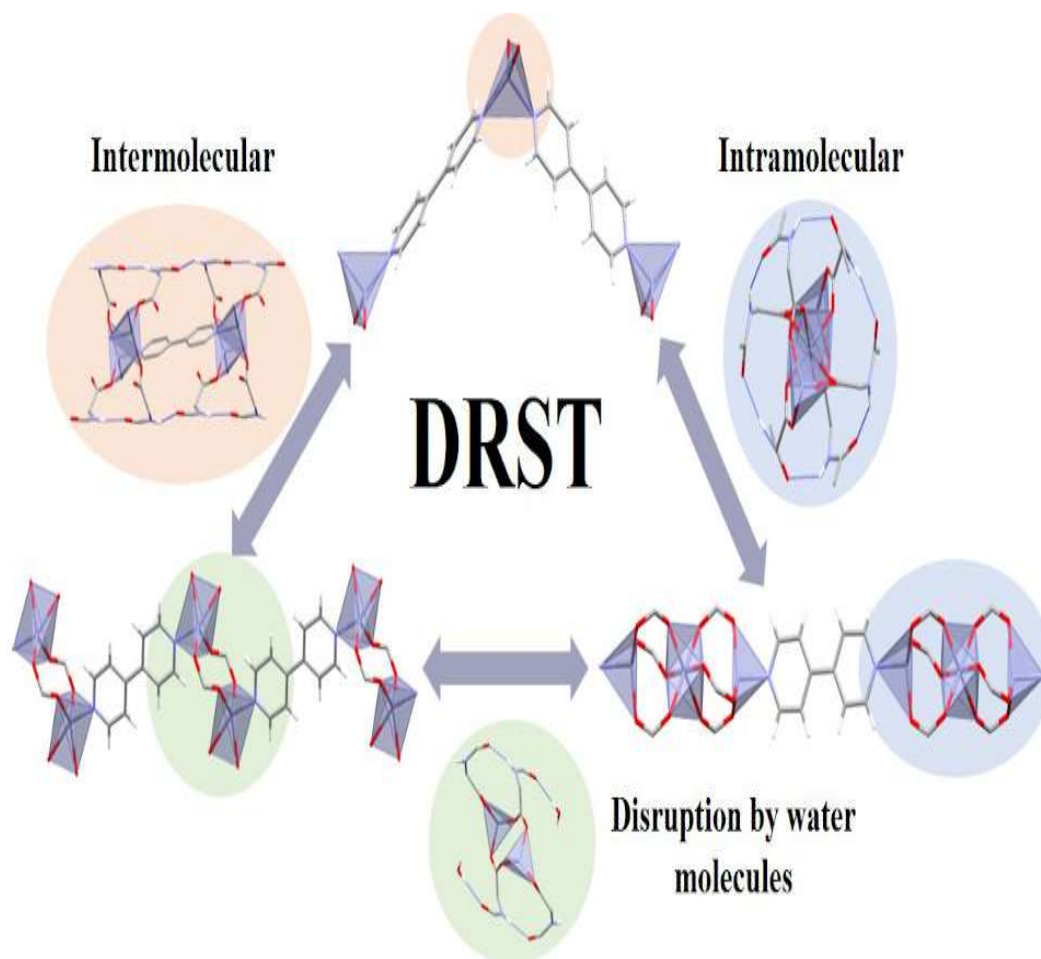
actualidad presenta una remarcable atención, en particular cuando se obtienen estructuras diferentes y además estas son reversibles.

Nuestro grupo ha sintetizado y caracterizado cuatro Zn(II) CPs. La reacción entre $\text{Zn}(\text{OAc})_2$ (OAc = acetato), α -acetoamidocinnámico acid (HACA) and 4,4'-bipiridina (4,4'-bipy) obteniendo el compuesto $\{[\text{Zn}(\text{ACA})_2(4,4'\text{-bipy})]\cdot\text{EtOH}\}_n$ (**1**). Este compuesto es el reactivo que se ha usado para la formación de tres CPs, mediante transformaciones estructurales disolución-recristalización (DRSTs).



El estudio de las cuatro estructuras cristalinas revela la formación de diferentes unidades secundarias (SBUs), monómeros, dímeros y trímeros unidos entre ellos mediante el ligando 4,4'-bipy. La obtención de uno u otro compuesto depende del disolvente y/o temperatura. Además, se ha estudiado la reversibilidad y la conversión entre los cuatro CPs y se ha demostrado que estas transformaciones son reversibles en la mayoría de los casos.

Finalmente, la fotoluminiscencia en estado sólido ha sido analizada y ha evidenciado que el efecto de los grupos amida no sólo predetermina un diferente SBUs sino también una diferente emisión de estos cuatro compuestos.



Este trabajo contribuye a comprender la relación entre estructura y propiedades en los CPs, y presenta unos ejemplos de CPs formados con los mismos ligandos que presentan diferentes ordenaciones estructurales lo que lleva a unas propiedades luminiscentes diferentes.

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

Referencias

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

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](#)