

14/03/2022

## Síntesi a la carta de complexos de coure amb diferents estructures cristal·lines



Els compostos de coordinació són complexos químics que contenen un àtom central i altres àtoms o molècules que l'envolten. L'equip de recerca de Josefina Pons ha sintetitzat i analitzat l'estructura cristal·lina de complexos on l'àtom central és un ió de coure (II) i ha aconseguit obtenir per separat dues disposicions diferents, lineal o en zig-zag, segons petites modificacions en les condicions de síntesi.

iStock/statu-nascendi

En la formació de polímers de coordinació és essencial estudiar la disposició estructural i els factors que influeixen en la formació d'aquests compostos. Petites modificacions en les condicions de síntesis poden portar a la formació de diferents disposicions estructurals, que afecten tant a les propietats químiques com físiques. La enginyeria de cristalls és una estratègia per dissenyar i així obtenir noves estructures controlant la tipologia mitjançant la formació d'enllaços de coordinació.

Els factors que afecten la formació d'una determinada disposició estructural són a) relació molar b) estructura dels lligands c) sovent d) geometria entorn del metall e) presència d'anions. Petites modificacions d'alguns d'aquests paràmetres poden portar a la formació d'isòmers cis o trans. Aquests isòmers presenten diferents propietats tant químiques com físiques.

Es complexos de Cu(II)-carboxilat i substituents N-aromàtics presenten una gran varietat de possibilitats i les seves propietats es poden veure fortament afectades per la presència

d'interaccions  $\text{H}_2\text{O}\cdots\text{Cu}$ . El disseny de xarxes de  $\text{Cu(II)}$  és apropiada per la adsorció/desorció d'aigua. Desafortunadament, aquests materials es descomponen ràpidament després d'uns quants cicles d'adsorció/desorció.

Prèviament, el nostre grup d'investigació ha publicat la síntesis i caracterització de diferents complexos de  $\text{Cu(II)}$  que contenen lligands carboxilats i N-aromàtics i hem observat que la presència de molècules d' $\text{H}_2\text{O}$  influeixen en l'empaquetament de l'estructura.

Com a continuació d'aquests estudis, en aquest treball presentem la síntesis i caracterització de compostos  $\text{Cu(II)}$ -carboxilat i 4,4'-bipiridina i s'han obtingut dos polímers de coordinació amb disposició 1D. La coordinació d'una molècula de  $\text{H}_2\text{O}$  al  $\text{Cu(II)}$  porta a la formació de cadenes lineals, mentre que el compost que no conté molècules d'aigua la disposició de les cadenes és en zig-zag.

Els dos polímers de coordinació s'han obtingut simultàniament i ha sigut possible resoldre l'estructura cristal·lina dels dos compostos. La modificació de les condicions sintètiques (relació molar i dissolvent de síntesis) ha permès obtenir els dos isòmers de forma separada. En la literatura, hi ha molts pocs casos descrits on els polímers de coordinació enllaçats per la 4,4'-bipiridina s'han pogut obtenir per separat canviant el mètode sintètic. També hi ha molts pocs exemples on dos isòmers geomètrics cristal·litzin simultàniament. En aquests casos es de destacar que no s'han trobat rutes sintètiques que permetin obtenir-los per separat a diferència dels dos compostos presentats en aquest treball que sí que ha estat possible obtenir-los per separat.

### Josefina Pons

Departament de Química

Universitat Autònoma de Barcelona

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

### Referències

Sánchez-Férez, Teresa Calvet, Mercè Font-Bardía, Josefina Pons, **Cu(II) coordination polymers with 4,4'-bipyridine. Synthesis and crystal structures**, *Journal Molecular Structure*, (2021) 1235, 130219

[View low-bandwidth version](#)