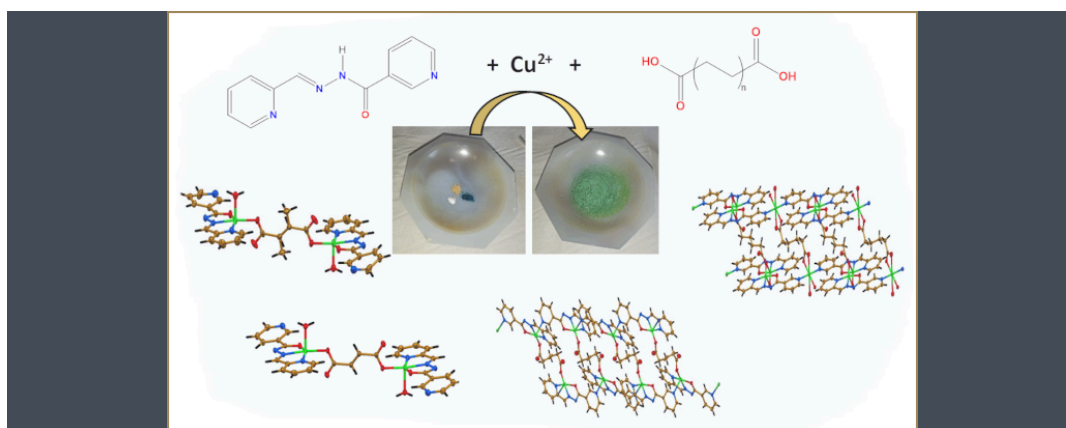


03/03/2025

## Síntesi sostenible de nous complexos de coure (II) amb lligands orgànics



Els complexos de coordinació metàl·lics poden donar lloc a estructures superiors, que reben especial atenció per les seves múltiples aplicacions segons diverses disciplines. Personal investigador de l'ICMAB ha participat en la preparació de nous complexos de coure (II) i ha avaluat l'efecte de la llargada i la flexibilitat dels lligands, així com un nou mètode de síntesi més sostenible que el tradicional en solució.

Els complexos de coordinació són objecte d'estudi d'especial importància en l'àrea de la química inorgànica per les seves incomputables aplicacions. Generalment, estan formats per un àtom central, que pot ser metàl·lic, i per lligands que s'hi coordinen al voltant. La preparació de complexos metàl·lics a partir de lligands orgànics multidentats, com poden ser les bases de Schiff i d'altres lligands nitrogenats, és ben coneguda a la bibliografia. Sota aquest principi, una selecció adequada dels lligands i la seva combinació pot donar lloc a estructures superiors com poden ser els polímers de coordinació o les estructures metal·orgàniques (MOFs, de l'anglès metal-organic frameworks). L'interès creixent per aquests nous materials es deu principalment no només a la gran diversitat d'estructures que se n'obtenen o a les diferents conformacions que poden presentar els lligands, sinó també a les seves possibles aplicacions en diferents àrees com són la catàlisi, els sensors moleculars, els materials luminescents o, fins i tot, materials amb aplicacions farmacèutiques.

En aquest treball, el grup de Cristal·lografia de l'Institut de Ciència de Materials de Barcelona (ICMAB-CSIC) en col·laboració amb d'altres grups de recerca nacionals i internacionals (vegeu referència) ha estudiat la formació de complexos de coordinació de coure (II) amb dos tipus de lligands orgànics: per una part, un lligand multidentat i flexible com és una hidrazida, un tipus de base de Schiff, i, per una altra banda, una col·lecció d'àcids dicarboxílics amb diferent flexibilitat i llargària que actuen com a pont entre els àtoms de coure.

Per obtenir els complexos, s'han provat diferents mètodes de preparació incloent la síntesi tradicional en solució, per cristal·lització per addició d'un antisolvent o suspensió, però també un mètode verd i sostenible com és la síntesi per mecanoquímica, que permet iniciar reaccions químiques a través de l'impacte i la fricció. Anteriorment, en d'altres treballs, havíem demostrat com el mètode de grinding permet la preparació de formes sòlides multicomponents de principis farmacèuticament actius. En aquest nou treball, hem estès l'ús de la mecanoquímica al camp de l'enginyeria cristal·lina per a la preparació de compostos metàl·lics discrets i polimèrics. En total, hem preparat i caracteritzat quatre nous compostos de coure (II) amb aquests dos tipus de lligands, que ens han permès comprovar la influència de la llargària i la flexibilitat de l'àcid dicarboxílic en les estructures resultants.

Tots els compostos han estat caracteritzats mitjançant difracció de Raigs X en pols i de monocristall, espectroscòpies d'infraroig i d'ultraviolat-visible i anàlisi termogravimètric. Finalment, mitjançant càlculs quàntics de DFT s'han estudiat les interaccions  $\pi$ -stacking en els dos compostos no polimèrics. Aquest tipus d'interaccions són les que faciliten la formació d'enllaços d'hidrogen i, per tant, determinen les estructures observades en l'estat sòlid.

Aquest article contribueix no només en ampliar l'abast de compostos de coordinació de coure (II) coneguts sinó que també dóna una informació valuosa de com la llargada dels lligands influeix en l'estructura, en les seves propietats físiques i, per tant, en les seves possibles aplicacions. A més s'ha mostrat com l'ús de la mecanoquímica permet obtenir de forma fàcil i senzilla els compostos descrits.

**Mónica Benito; Elies Molins**

Grup de Cristal·lografia

Institut de Ciència de Materials de Barcelona (ICMAB-CSIC)

Esfera UAB

[mbenito@icmab.es](mailto:mbenito@icmab.es); [elies.molins@icmab.es](mailto:elies.molins@icmab.es)

## Referències

Mónica Benito, Ghodrat Mahmoudi, Elies Molins, Ennio Zangrando, Masoumeh Servati Gargari, Antonio Frontera, Damir A. Safin. **Discrete versus polymeric structures of coordination compounds of copper (II) with (pyridin-2-yl)methylenenicotinohydrazide and a library of dicarboxylic acids.** *Inorg. Chem. Commun.* 2024, 170, 113150.

<https://doi.org/10.1016/j.inoche.2024.113150>

[View low-bandwidth version](#)