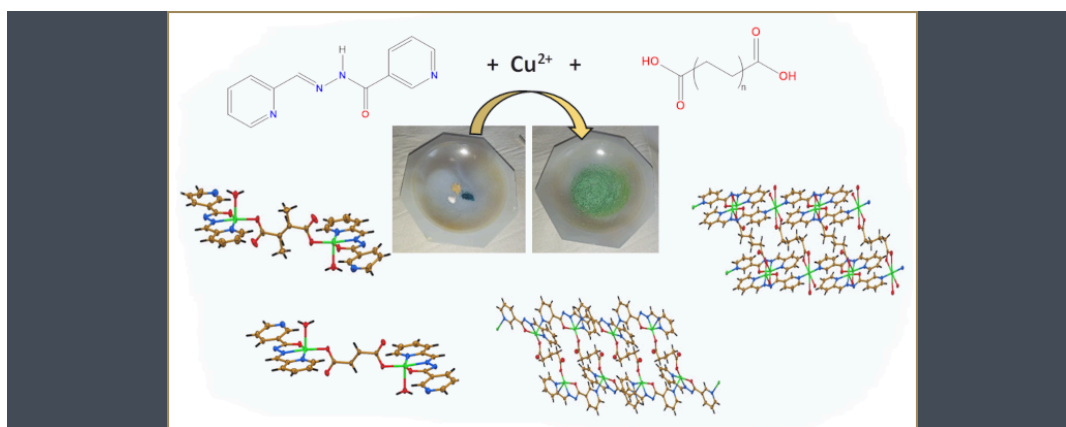


03/03/2025

## Síntesis sostenible de nuevos complejos de cobre (II) con ligandos orgánicos



Los complejos de coordinación metálicos pueden dar lugar a estructuras superiores, que reciben especial atención por sus múltiples aplicaciones según varias disciplinas. Personal investigador del ICMAB ha participado en la preparación de nuevos complejos de cobre (II) y ha evaluado el efecto de la longitud y la flexibilidad de los ligandos, así como un nuevo método de síntesis más sostenible que el tradicional en solución.

Los complejos de coordinación son objeto de estudio de especial importancia en el área de la química inorgánica por sus incontables aplicaciones. Generalmente, están formados por un átomo central, que puede ser metálico, y por ligandos que se coordinan alrededor. La preparación de complejos metálicos a partir de ligandos orgánicos multidentados, como pueden ser las bases de Schiff y otros ligandos nitrogenados, es bien conocida en la bibliografía. Bajo este principio, una selección adecuada de los ligandos y su combinación puede dar lugar a estructuras superiores como pueden ser los polímeros de coordinación o las estructuras metal-orgánicas (MOFs, del inglés metal-organic frameworks). El interés creciente por estos nuevos materiales se debe principalmente no solo a la gran diversidad de estructuras que se obtienen o a las distintas conformaciones que pueden presentar los ligandos, sino también a sus posibles aplicaciones en diferentes áreas como son la catálisis,

los sensores moleculares, los materiales luminiscentes o incluso materiales con aplicaciones farmacéuticas.

En este trabajo, el grupo de Cristalografía del Institut de Ciència de Materials de Barcelona (ICMAB-CSIC) en colaboración con otros grupos de investigación nacionales e internacionales (ver referencia) ha estudiado la formación de compuestos de coordinación de cobre (II) con dos tipos de ligandos orgánicos: por un lado, un ligando multidentado y flexible como es una hidrazida, un tipo de base de Schiff, y, por otro lado, una colección de ácidos dicarboxílicos con diferente flexibilidad y longitud que actúan como puente entre los átomos centrales de cobre.

Para obtener los complejos, se han probado distintos métodos de preparación incluyendo la síntesis tradicional en solución, mediante cristalización por adición de un antisolvente o suspensión, pero también un método verde y sostenible como es la síntesis mecanoquímica, que permite iniciar reacciones químicas a través del impacto y la fricción. Anteriormente, en otros trabajos, habíamos demostrado como el método de grinding permite la preparación de formas sólidas multicomponentes de principios farmacéuticamente activos. En este nuevo trabajo, hemos extendido el uso de la mecanoquímica al campo de la ingeniería cristalina para la preparación de compuestos metálicos discretos y poliméricos. En total, hemos preparado y caracterizado cuatro nuevos compuestos de cobre (II) con estos dos tipos de ligandos, que nos han permitido comprobar la influencia de la longitud y la flexibilidad del ácido dicarboxílico en las estructuras resultantes.

Todos los compuestos han sido caracterizados mediante difracción de rayos X en polvo y de monocristal, espectroscopias de infrarrojo y de ultravioleta-visible y análisis termogravimétrico. Finalmente, mediante cálculos cuánticos de DFT se han estudiado las interacciones  $\pi$ -stacking en los dos compuestos no poliméricos. Este tipo de interacciones son las que facilitan la formación de enlaces de hidrógeno y, por lo tanto, determinan las estructuras observadas en estado sólido.

Este artículo no solo contribuye a ampliar el abasto de compuestos de coordinación de cobre (II) conocidos, sino que también da una información valiosa de como la largada de los ligandos influye en la estructura, en sus propiedades físicas y, así, en sus posibles aplicaciones. Además, se ha mostrado como el uso de la mecanoquímica permite obtener de forma fácil y sencilla los compuestos descritos.

**Mónica Benito; Elies Molins**

Grupo de Cristalografía

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)

## Referencias

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)methylenicotinohydrazide 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](#)