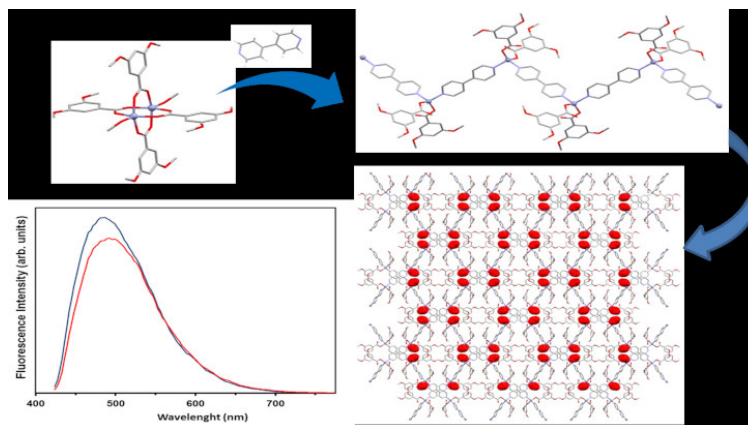


29/01/2021

Síntesi de polímers de coordinació i compostos de zinc



La 4,4'-bpy és un dels lligands que, juntament amb els de tipus carboxilat, permet obtenir polímers de coordinació. El treball present es focalitza en la influència d'aquests dos lligands per tal de determinar l'estructura de compostos de zinc i dels polímers dissenyats. La complexitat de l'estructura final d'aquests, però, en complica l'obtenció i exigeix considerar diversos paràmetres i efectuar moltes reaccions. A més, és interessant la luminescència que presenten aquests polímers (blau/verd). Poden ser útils com a materials fotoactius.

Els polímers de coordinació (CPs) tenen un gran interès a causa de les seves interessants propietats físiques i químiques. Un dels lligands més útils per tal d'obtenir aquesta família de polímers és la 4,4'-bipyridine (4,4'-bpy), un lligand que pot actuar com a enllaç entre metalls de transició i que, per tant, és útil per obtenir polímers de coordinació. L'estructura diversa dels polímers depèn, en gran manera, de la geometria del metall i de la relació metall : lligand. S'obtenen des de cadenes mono-dimensionals (1D) fins a xarxes tridimensionals (3D).

Quan la proporció metall: lligand és 1:1, normalment es formen cadenes en zig-zag, mentre que si la proporció és 1:2, es formen reixetes quadrades i també estructures anàlogues al diamant, entre d'altres. En l'obtenció d'unes o altres estructures també tenen un paper destacat els anions, els valors de pH, així com el dissolvent utilitzat tant en la síntesi com en la recristal·lització dels productes. Variant alguns d'aquests factors s'han obtingut complexos amb diferents estructures i/o dimensionalitats.

Encara que normalment la 4,4'-bpy actua com a lligand pont, també pot actuar com a mono-dentat i inclús es pot trobar com a lligand no-coordinant. En aquest últim cas està unit a la molècula per enllaços d'hidrogen i/o π - π interaccions.

Les estructures supramoleculares d'aquests compostos poden presentar cavitats/canals que els permetin atrapar molècules en el seu interior. Per tot això, és difícil dissenyar els experiments per mitjà dels quals obtenir polímers de coordinació amb l'estructura desitjada. Per aconseguir el producte que es vol, doncs, s'han de dissenyar i portar a terme moltes reaccions (són molts els paràmetres que s'han de tenir en compte).

Els lligands carboxilats també són molt importants en el disseny de CPs, en concret si la síntesi es fa juntament amb la 4,4'-bpy. Els grups HO- dels lligands carboxilats poden participar en la formació d'enllaços d'hidrogen intermoleculares i, per tant, en la formació de cadenes polimèriques.

La finalitat d'aquest treball és estudiar la influència de diferents lligands carboxilats juntament amb la 4,4'-bpy en l'estructura de compostos de zinc. Els compostos $[\text{Zn}(3,5\text{-(MeO)}_2\text{Bz})_2(\text{CH}_3\text{OH})]_2$ ($3,5\text{-(MeO)}_2\text{Bz} = 3,5\text{-dimetoxibenzoat}$) i $[\text{Zn}(\mu\text{-}3,5\text{-(OH)}_2\text{Bz})(\mu\text{-OH}_2)(\text{H}_2\text{O})_2]$ ($3,5\text{-(OH)}_2\text{Bz} = 3,5\text{-dihidroxobenzoat}$), s'han utilitzat com a precursors en la síntesi de CPs. S'han obtingut quatre CPs i s'ha demostrat la influència del dissolvent en l'obtenció d'un o altre CPs.

Tots els compostos obtinguts s'han caracteritzat per tècniques analítiques i espectroscòpiques. Per tots ells s'han obtingut monocristalls per la seva resolució per difracció de raig-X, els quals presenten una estructura polimèrica en zig-zag. També s'han analitzat les estructures supramoleculares i s'han registrat i analitzat els espectres de luminescència en estat sòlid que han generat una forta emissió de fluorescència (blau/verda). Són compostos que poden ser útils com a materials fotoactius.

Josefina Pons

Universitat Autònoma de Barcelona.

Departament de Química.

Àrea de Química Inorgànica

josefina.pons@uab.cat

Referències

Francisco Sánchez-Férez, Roger Pou, Laura Bayés-García, Mercè Font-Bardía, Josefina Pons, José A. Ayllón. **Benzoate substituents effects on the structure of Zn(II) complexes and 1D 4,4'-bipyridine derived coordination polymers**, *Inorganica Chimica Acta*, 2020, 500, <https://doi.org/10.1016/j.ica.2019.119218>

[View low-bandwidth version](#)