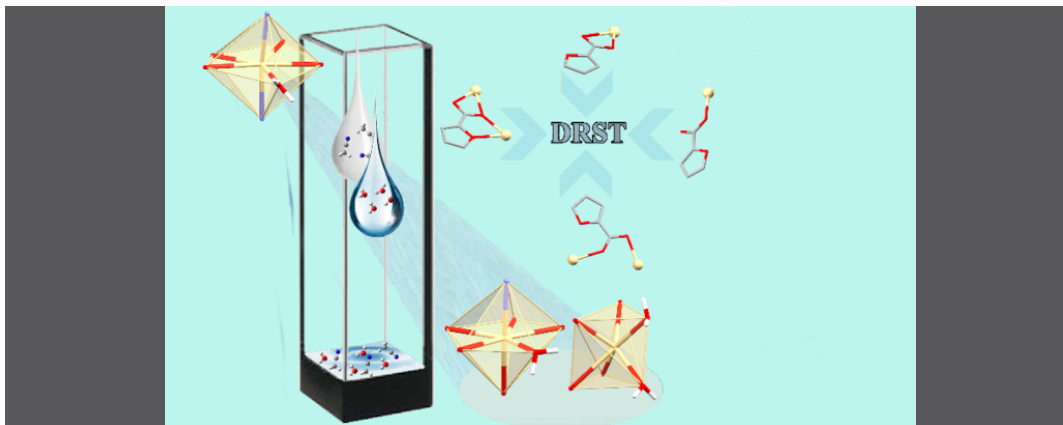


26/09/2023

## Complexos de zinc i cadmi amb propietats òptiques



L'enginyeria de cristalls té un paper essencial per entendre com s'acoblen lligands orgànics i ions metàl·lics a l'hora de sintetitzar materials amb propietats especials. Investigadors del Departament de Química han sintetitzat quatre compostos de zinc i cadmi amb l'àcid 2-furoic, incloent-hi un polímer de coordinació, i n'han estudiat les propietats òptiques. L'estudi amplia la comprensió dels polímers de coordinació i el paper dels dissolvents a la seva formació.

Per entendre els factors que governen l'auto assemblatge dels lligands orgànics amb els ions metàl·lics és essencial l'enginyeria de cristalls i els seus dissenys moleculars per a poder aconseguir les propietats desitjades. Petites modificacions de les condicions sintètiques permeten obtenir estructures des de monòmers a polímers de coordinació.

Els complexos de coordinació que contenen ions  $d^{10}$  s'han convertit en un àrea important en el camp de la investigació, principalment en el desenvolupament de materials òptics (luminescents, sensors de detecció, conductors elèctrics).

Els compostos de Zn(II) i Cd(II) presenten una gran varietat de números de coordinació i una gran diversitat estructural. Per als compostos de Zn(II) els números de coordinació van entre 4 i 6 i per als de Cd(II) podem arribar fins a 7. Quan aquests compostos contenen ions carboxilats, l'estructura més habitual és la dimèrica. Si aquests compostos es fan reaccionar amb piridines s'observa una augment de la dimensionalitat.

Si ens basem en la potencial coordinació de l'àcid 2-furoic (2-FA), ens vàrem plantejar la

preparació de compostos amb aquest àcid, amb la finalitat d'estudiar l'enllaç M-O (O=oxígens del 2-FA), així com estudiar la competitivitat entre ells.

En aquest treball hem assajat la reacció entre  $M(\text{OAc})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$  ( $M=\text{Zn}(\text{II}), \text{Cd}(\text{II})$ ; OAc=acetat), 2-FA, 4-acetilpiridina (4-Acpy) o isonicotinamida (Isn) en metanol com a solvent. S'han obtingut 4 compostos (3 dímers i 1 monòmer). Els números de coordinació d'aquests quatre compostos van entre 5 i 7. La recristal·lització del monòmer  $[\text{Cd}(\text{2-FA})_2(\text{4-Acpy})_2(\text{OH}_2)]$  en acetonitril porta a la formació d'un intricat polímer de coordinació (CP). En aquest polímer l'oxigen-furà coordina al Cd(II). Aquest procés és una transformació estructural de dissolució-recristal·lització (DRST).

Amb els complexos sintetitzats s'han analitzat les propietats fotofísiques en solució i s'han calculat els rendiments quàntics.

Aquest estudi ha servit per demostrar la competitivitat entre la coordinació de l'aigua, l'anió carboxilat i l'oxigen de l'anell furà en el procés de formació del polímer per un procés DRST. Aquest procés s'ha analitzat mitjançant raigs X i experiments de fluorescència.

Aquest article contribueix a augmentar el nombre de polímers de coordinació descrits a la literatura, en els quals el procés DRST és crucial per a l'obtenció dels compostos, així com el coneixement sobre el paper dels dissolvents en aquests processos.

**Daniel Ejarque, Josefina Pons**

Departament de Química

Universitat Autònoma de Barcelona

[daniel.ejarque@uab.cat](mailto:daniel.ejarque@uab.cat), [josefina.pons@uab.cat](mailto:josefina.pons@uab.cat)

### Referències

Daniel Ejarque, Francisco Sánchez-Férez, Núria Félez-Guerrero, Teresa Calvet, Mercè Font-Bardiac i Josefina Pons. **Pyridine-driven assembly of Zn(II) and Cd(II) complexes with 2-furoic acid. The role of water in a structural transformation.** *CrystEngComm*. 2023, 25, 2739-2754. DOI: [/10.1039/D3CE00104K](https://doi.org/10.1039/D3CE00104K)

[View low-bandwidth version](#)