

Dynamic metal-organic frameworks with adaptable porosity

Dr. Guillermo Mínguez Espallargas

Instituto de Ciencia Molecular (ICMol)

University of Valencia (Spain)

Jueves, 4 de febrero de 2021

12:30 h

On-line (vía Zoom)

Link: <https://zoom.us/j/92332447668>

CICLO CONFERENCIAS ISQCH 2021

ISQCH
Instituto de Síntesis Química y Catálisis Homogénea

Facultad de Ciencias, Universidad de Zaragoza - CSIC
C/ Pedro Cerbuna, 12. Zaragoza 50009. Spain



CSIC
CONSEJO SUPERIOR DE INVESTIGACIONES CIENTÍFICAS



**Universidad
Zaragoza**



**Facultad de Ciencias
Universidad Zaragoza**

Dynamic metal-organic frameworks with adaptable porosity

Summary

Guillermo Mínguez Espallargas

Instituto de Ciencia Molecular (ICMol), University of Valencia (Spain)

email: guillermo.minguez@uv.es

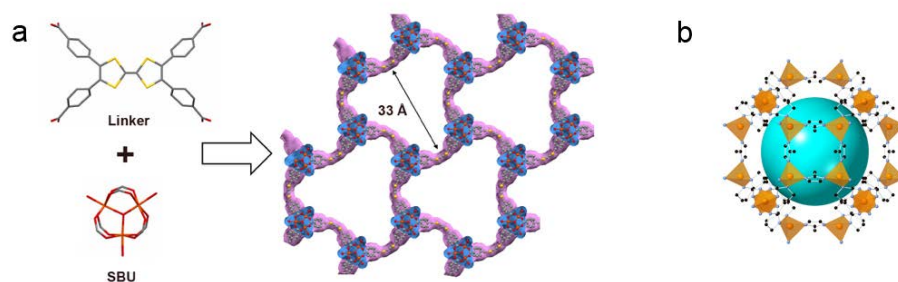
Metal-organic frameworks (MOFs), also known as porous coordination polymers (PCPs), have emerged in the last 30 years as revolutionary molecular materials with applications in societal and industrially relevant domains such as storage of fuels (hydrogen and methane), capture of gases (e.g. greenhouse gases), separation, drug delivery and catalysis, among others.^[1] Recent advances in this area in the past decade has resulted in an explosive growth in their preparation, characterization, and study, with more than 80.000 MOFs reported. The common property for all these open crystalline frameworks is their permanent porosity constructed from the assembly of inorganic subunits and organic linkers, providing an assortment of topologies and different architectures that can be intended by chemical design.

Although chemical robustness of MOFs have been key features in terms of possible industrial applications, dynamic MOFs involving changes in their physical and structural properties upon an external stimulus are an interesting subclass of these crystalline materials as their response to various stimuli can be fine-tuned.^[2,3] Typically, the reversible transformation occurs through well-defined transitions, but in some cases a “breathing” behaviour is observed.

In this line, we will first discuss the formation of a highly stable MOF based on Fe(III) with a non-interpenetrated hierarchical crystal structure and an enhanced catalytic activity.^[4] This MOF shows a continuous breathing behaviour with a reversible swelling upon solvent adsorption, which affects the planarity of the TTF linkers. This breathing behaviour directly impacts on its electrochemical properties and thus opens the way for the development of new electrochemical sensors.^[5,6] On the contrary, the interpenetrated analogue, **MUV-2-i**, shows a reduced breathing capacity.^[7]

Then, we will show a solvent-free synthetic protocol compatible with Fe^{II} that serves to obtain single crystals of the iron analogue of ZIF-8, an elusive MOF.^[8] This synthetic procedure is also compatible with the formation of ZIF-8 and ZIF-67. This methodology is also valid for the formation of layered Fe(II)-imidazolate frameworks that can be exfoliated down to the monolayer.^[9,10]

Figure 1. a) Representation of the crystal structure of **MUV-2** showing the mesoporous channels; b) Crystal structure of **MUV-3**, isostructural to ZIF-8.



References

1. Special Issue on Metal-organic frameworks and porous polymers – current and future challenges: *Chem. Soc. Rev.*, **2017**, *46*, 3104.
2. Mínguez Espallargas, G.; Coronado, E. *Chem. Soc. Rev.*, **2018**, *47*, 533.
3. Morris, R. E.; Brammer, L. *Chem. Soc. Rev.*, **2017**, *46*, 5444.
4. Souto, M.; Santiago-Portillo, A.; Palomino, M.; Vitorica-Yrezabal, I. J.; Bieira, B. J. C.; Waerenborgh, J. C.; Valencia, S.; Navalón, S.; Rey, F.; García, H.; Mínguez Espallargas, G. *Chem. Sci.*, **2018**, *9*, 2413–2418.
5. Souto, M.; Romero, J.; Calbo, J.; Vitorica-Yrezabal, I. J.; Zafra, J. L.; Casado, J.; Ortí, E.; Walsh, A.; Mínguez Espallargas, G. *J. Am. Chem. Soc.*, **2018**, *140*, 10562.
6. Souto, M.; Calbo, J.; Mañas-Valero, S.; Walsh, A.; Mínguez Espallargas, G. *Beilstein J. Nanotechnol.* **2019**, *10*, 1883.
7. Vicent-Morales, M.; Vitorica-Yrezabal, I. J.; Souto, M.; Mínguez Espallargas, G. *CrystEngComm* **2019**, *21*, 3031.
8. López-Cabrelles, J.; Romero, J.; Abellán, G.; Giménez-Marqués, M.; Palomino, M.; Valencia, S.; Rey, F.; Mínguez Espallargas, G. *J. Am. Chem. Soc.*, **2019**, *141*, 7173–7180.
9. López-Cabrelles, J.; Mañas-Valero, S.; Vitorica-Yrezabal, I. J.; Bereciartua, P. J.; Rodríguez-Velamazán, J. A.; Waerenborgh, J. C.; Vieira, B. J. C.; Davidovikj, D.; Steeneken, P. G.; van der Zant, H. S. J.; Mínguez Espallargas, G.; Coronado, E. *Nature Chem.* **2018**, *10*, 1001–1007.
10. León-Alcaide, L.; López-Cabrelles, J.; Mínguez Espallargas, G.; Coronado, E. *Chem. Commun.* **2020**, *56*, 7657–7660.

Guillermo Mínguez Espallargas

Ramon y Cajal Fellow
Instituto de Ciencia Molecular (ICMol)
Universidad de Valencia
c/ Catedrático José Beltrán, 2
46980 Paterna (SPAIN)
Tel: +34 96 354 4420
guillermo.minguez@uv.es



Guillermo Mínguez Espallargas (1981) es Profesor Titular de la Universidad de Valencia. Se licenció en Ciencias Químicas por la Universidad de Sevilla en 2004 (Premio Extraordinario y Segundo Premio Nacional) y se doctoró en 2007 en la Universidad de Sheffield (Reino Unido).

En 2008 se incorporó al Instituto de Ciencia Molecular (ICMol), primero como postdoc y a partir de 2009 con un contrato Juan de la Cierva, empezando una línea nueva de investigación combinando su experiencia previa en ingeniería cristalina y el conocimiento adquirido en magnetismo para desarrollar polímeros de coordinación magnéticos con comportamiento dinámico. Actualmente el trabajo de Guillermo se dirige tanto al desarrollo de materiales moleculares que formen redes tridimensionales porosas, denominados MOFs (Metal Organic Frameworks), como la síntesis de nuevo materiales bidimensionales análogos al grafeno.

Su actividad investigadora ha dado lugar a 72 publicaciones en revistas de alto impacto (índice medio de impacto = 8), recibiendo un total de 5000 citaciones y un índice-h de 29. Guillermo ha sido invitado a más de 30 congresos, incluyendo 3 conferencias plenarias y 5 “keynote lectures”. Ha recibido, entre otros premios, el “Premio Fundación Princesa de Girona” en Investigación Científica, el “Premio a Jóvenes Investigadores de la Real Sociedad Española de Química”, el “Premio Xavier Solans” del Grupo Especializado de Cristalografía y Crecimiento Cristalino, el “Dalton Young Research Award” de la *Royal Society of Chemistry*, y la Medalla de Oro del “European Young Chemist Award”.