

Síntese e análise estrutural de clusters derivados de *bis*(fenilseleneto) de mercúrio

Bárbara Tirloni (PG)*, Rafael Stieler (PG), Ernesto S. Lang (PQ), Gelson M. de Oliveira (PQ), Marcos A. Villetti (PQ). *e-mail: batirloni@yahoo.com.br

LMI – Departamento de Química, Universidade Federal de Santa Maria, 97105-900, Santa Maria, RS, Brasil.

Palavras Chave: cluster, selênio, mercúrio, difração de raios-X.

Introdução

A pesquisa envolvendo a síntese de clusters de organocalcogenetos metálicos está em evidência devido as possibilidades de aplicações como novos materiais.¹ A investigação desses compostos está concentrada em sínteses que proporcionem uma modulação adequada do tamanho e da forma da estrutura molecular, já que suas propriedades físicas e químicas estão associadas à sua forma e dimensão.²

Resultados e Discussão

No presente trabalho são descritas a síntese e a caracterização estrutural dos clusters $[Hg_4(SePh)_7X(L)]_n$, onde X = Cl (1) e I (2); L = py (1) e dmf (2) (Figura 1).

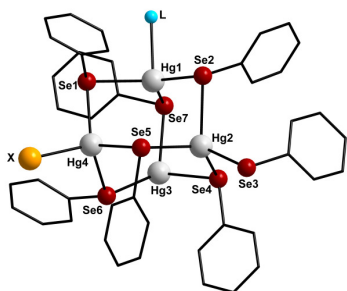
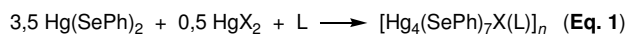


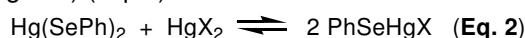
Figura 1. Projeção da unidade assimétrica dos clusters $[Hg_4(SePh)_7X(L)]_n$, onde X = Cl (1) e I (2); L = py (1) e dmf (2). Para maior clareza, foram omitidos os átomos de hidrogênio.

As reações para a obtenção de 1 e 2 ocorrem de acordo com a estequiometria a seguir (Eq. 1):



X = Cl (1), I (2)
L = py (1), dmf (2)

A partir da análise de trabalhos anteriores, podemos propor que a síntese desses compostos baseia-se na formação do intermediário $PhSeHgX$ (X = halogênio) (Eq. 2).³

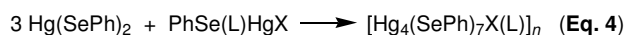


A utilização de co-ligantes é importante na formação dos intermediários, interferindo na existência destes e na formação do produto final (Eq. 3).



32ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

O intermediário estabilizado pelo co-ligante reage com o *bis*(fenilseleneto) de mercúrio, levando a formação de $[Hg_4(SePh)_7X(L)]_n$ (Eq. 4).



Os clusters 1 e 2 são bastante similares e apresentam a forma de um adamantano. A principal diferença entre 1 e 2, além da presença de diferentes halogênios é a atuação de diferentes moléculas de solvente atuando como ligantes. Para 1 e 2 os comprimentos de ligação Se-Hg situam-se na faixa de 2,54(12) a 2,77(12) Å. Para 1, os comprimentos de ligação Cl-Hg e N-Hg são 2,514(3) e 2,453(5) Å, respectivamente. Para 2, os comprimentos de ligação I-Hg e O-Hg são 2,7513(9) e 2,5453(4) Å, respectivamente. As estruturas de 1 e 2 consistem em uma cadeia polimérica unidimensional com unidades adamantóides conectadas através de ligações do tipo ponte $Hg-\mu_2-Se-Hg$ (Figura 2).

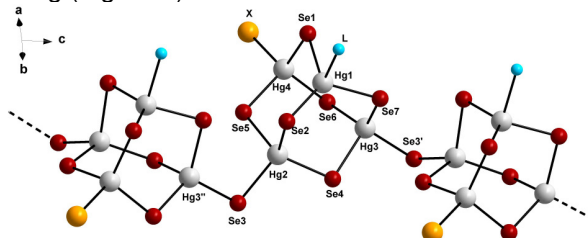


Figura 2. Projeção da cadeia polimérica de 1 e 2 ao longo do eixo cristalográfico c. Para maior clareza, foram omitidos os átomos de carbono e hidrogênio. (') x, 0,5-y, -0,5+z; (") x, 0,5-y, 0,5+z.

Conclusões

Ficou demonstrado o uso de *bis*(fenilseleneto) de mercúrio como precursor para a preparação dos clusters 1 e 2 através de reações de redistribuição, sendo esta, uma metodologia eficiente para a obtenção de novos clusters.

Agradecimentos

CNPq – Fapergs/ PRONEX.

¹ Radloff, C.; Moran, C. E.; Jackson, J. B.; Halas, N. J.; Reed, M. A. e Lee, T. *Molecular Nanoelectronics* **2005**, ISBN: 1-58883-006-3, 229.

² Back, D. F.; de Oliveira, G. N. M.; Burrow, R. A.; Castellano, E. E.; Abram, U.; Lang, E. S. *Inorg. Chem.* **2007**, 46, 2356.

³ Lang, E. S.; Lopez, E. M. V.; Burrow, R. A.; Zan, R. A.; Gatto, C. C. *Eur. J. Inorg. Chem.* **2002**, 2, 331.