

## Síntese e Caracterização Estrutural de um Novo Cluster Derivado de um Organocalcogeneto de Hg(II).

Givago Prado Percim<sup>a</sup> (IC), Máisy I. P. R. Modesto<sup>a</sup> (IC), Lucas Pizzuti<sup>a</sup> (PQ), Simone Delezuk Inglez<sup>a</sup> (PQ), Samuel Leite de Oliveira (PQ), Cristiano Raminelli<sup>a</sup> (PQ), Gleison Antônio Casagrande<sup>a\*</sup> (PQ), Davi F. Back(PQ)<sup>b</sup>, Ernesto S. Lang (PQ)<sup>b</sup>. *gleisoncasagrande@ufgd.edu.br*

a) Laboratório de Síntese e Caracterização Molecular – FACET, Universidade Federal da Grande Dourados – UFGD; Dourados-MS, Brasil.

b) Laboratório de Materiais Inorgânicos – LMI, Universidade Federal de Santa Maria, UFSM – RS.

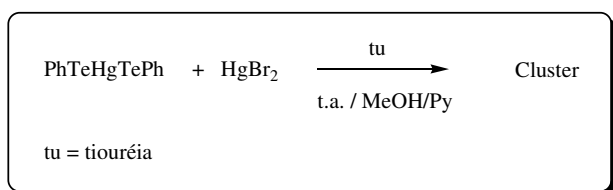
Palavras Chave: Telúrio, Difração de Raios-X, Clusters.

### Introdução

Clusters e nano-clusters contendo átomos de calcogênios ligados diretamente a metais do grupo 12 apresentam grande interesse e aplicabilidade sob o aspecto da química dos materiais funcionais<sup>1</sup>. Relatos a respeito de aplicações tecnológicas de Teluretos metálicos do tipo MTe (M = Metais do Grupo 12) exibindo fotoluminescência na janela do infravermelho, foram relatadas por Kelly e colaboradores<sup>2</sup>. Precedentes registrados na literatura, revelaram que clusters contendo unidades centrais HgTe podem ser considerados precursores sintéticos de materiais considerados semicondutores<sup>3</sup>. Neste trabalho, apresentamos a síntese e a caracterização estrutural por difração de Raios-X, de um novo cluster derivado do difenilditelureto de Mercúrio.

### Resultados e Discussão

O cluster foi sintetizado conforme esquema reacional abaixo:



Os dados relacionados à coleta de intensidades e ciclos de refinamentos obtidos na resolução da estrutura cristalina e molecular do cluster estão resumidos na tabela 1.

Tabela 1.

Fórmula molecular	C <sub>87</sub> H <sub>75</sub> Br <sub>2</sub> Hg <sub>8</sub> N <sub>3</sub> STe <sub>12</sub>
Massa Molecular (g/Mol)	4410.39
Sistema cristalino/ grupo espacial	Monoclínico / P2 <sub>1</sub> /c
a (Å)	29,5202(2)
b (Å)	13,95040(10)
c (Å)	27,2233(2)
β (°)	112,1280(10)
Índice final R [ >2σ (I)]	R1 = 0,0488, wR2 = 0,0798
Índice R (Todos os dados)	R1 = 0,0889, wR2 = 0,0889

A figura 1 ilustra a estrutura cristalina e molecular do Cluster obtido.

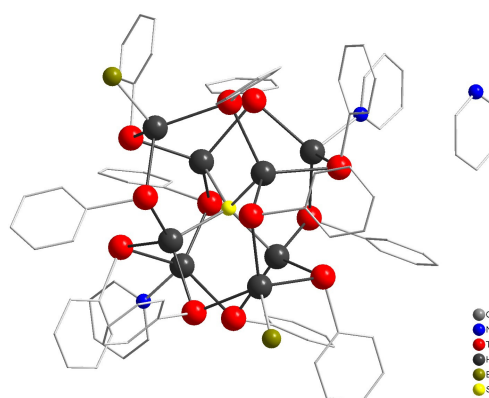


Figura 1. Cluster contendo unidades centrais Hg–Te.

O cluster caracterizado configura-se como um novo exemplo de molécula de alto peso molecular contendo unidades centrais Hg–Te. Clusters similares ao apresentado neste trabalho, e relatados na literatura, enfatizam a grande importância de moléculas desta natureza para o campo dos materiais funcionais<sup>1,3</sup>.

### Conclusões

Um novo cluster derivado do difenilditelureto de mercúrio foi sintetizado e caracterizado por difração de raios-X em monocristal. A presença de unidades Hg–Te na parte central do núcleo desta molécula, sugere um grande potencial aplicativo deste cluster como precursor de materiais do tipo HgTe.

### Agradecimentos

FUNDECT (Fundação de Apoio ao Desenvolvimento do Ensino, Ciência e Tecnologia do Estado de Mato Grosso do Sul) e ao CNPq.

<sup>1</sup> Casagrande G. A.; Horner M.; Lang E. S.; et al *Inorganica Chimica Acta* **2007**, 360, 1776.

<sup>2</sup> Kelly, M.S.; Stimer, T.; O’Neil, M.; *J. Am. Chem. Soc.* **2006**, 128, 7087.

<sup>3</sup> Solviev, V.N.; Eichhofer A.; Fenske, D.; Banin, U.; *J. Am. Chem. Soc.* **2001**, 123 2354.