Síntese e Caracterização Estrutural do Cluster $[(SePh)_7Hg_4(SCN)Py]$.

Simone Finoto (PG)[1*], Gleison A. Casagrande (PQ)[1], Eduardo J. de Arruda (PQ)[1], Andressa Ferle (PG)[1], Davi F. Back (PQ)[2]. *simonefinoto@hotmail.com*

[1]*Laboratório de Síntese e Caracterização Molecular (LSCM) – Universidade Federal da Grande Dourados- UFGD – Dourados/ MS*
[2]*Laboratório de Materiais Inorgânicos (LMI) – Universidade Federal de Santa Maria- UFSM – Santa Maria/ RS*

Palavras Chave: *Cluster, Selênio, Caracterização.*

Introdução

Clusters de calcogenetos metálicos podem apresentar várias aplicações no desenvolvimento de dispositivos eletrônicos e ópticos, dependendo de suas propriedades estruturais e físicas. Com vantagens de maior eficiência e baixo custo em comparação a outras tecnologias[1]. Sendo assim, o controle do tamanho e forma destes compostos sintetizados é de grande importância, como mostra os precedentes registrados na literatura[1,2]. Neste trabalho apresentamos a síntese, e caracterização estrutural do cluster derivado de difenildisseleneto de mercúrio, através da difração de raios-X, e de técnicas complementares; espectroscopia de infravermelho, e analise elementar.

Resultados e Discussão

O cluster foi sintetizado de acordo com a equação:

$$3{,}5\ (SePh)_2Hg + 0{,}5\ Hg(SCN)_2 \xrightarrow[\text{t.a}]{\text{MeOH/THF/Py}} [(SePh)_7Hg_4(SCN)Py]$$

A figura 1 ilustra a estrutura molecular obtida por difração de raios-X em monocristal.

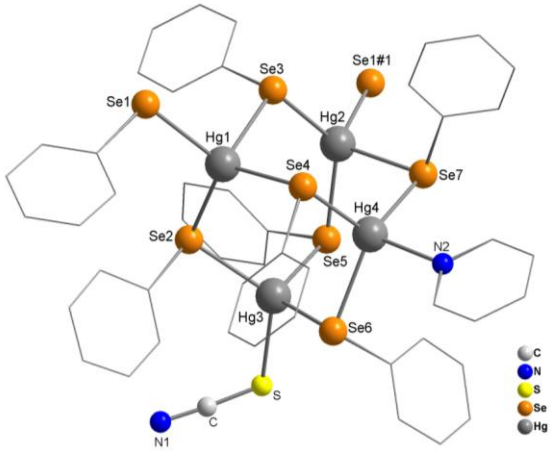

Figura 1. Cluster polimérico $[(SePh)_7Hg_4(SCN)Py]$.

Os dados relacionados ao refinamento da estrutura molecular do cluster estão resumidos na tabela 1. A unidade assimétrica do cluster apresenta uma estrutura de gaiolas de adamantano (Se-Hg) de 2,600Å à 2,730Å, onde os átomos de Hg(II) apresentam geometria de coordenação tetraédrica. E a cadeia polimérica é formada pela ligação intermolecular μ_2–Se(1)–Hg(2)#1 de 2,693Å ao longo do eixo cristalográfico *c*.

Tabela 1. Dados cristalográficos do cluster.

Fórmula molecular	$C_{48}H_{40}Hg_4N_2SSe_7$
Massa Molecular (g/ Mol)	2031,96
Sistema cristalino, grupo espacial	Monoclínico, $P2_1/c$
a (Å)	13,9991(5)
b (Å)	24,2237(8)
c (Å)	15,2676(6)
β (°)	101,814(2)
Índice de *R* Final [I>2σ(I)]	R_1 = 0,0550, wR_2 = 0,1160
Índice *R* (Todos os dados)	R_1 = 0,1008, wR_2 = 0,1284

O espectro de infravermelho do cluster apresenta um pico em 2104 cm^{-1} referente ao estiramento simétrico do grupo SCN, assim como os picos característicos dos grupos fenilas e da piridina, sendo estes os estiramentos simétricos em: 3053 cm^{-1} (C-H), 1571 cm^{-1} (C=C e C=N), 1475 cm^{-1} (C-H), e as deformações apresentadas em: 1433 cm^{-1} (C=C-H), 733 cm^{-1} (C=C-H) no plano, e 685 cm^{-1} (C=C-H) fora do plano.
Os valores da analise elementar estão na tabela 2.

Tabela 2. Analise elementar do cluster.

Analises	% Carbono	% Hidrogênio	% Nitrogênio
Teórico	27,71	1,91	1,23
Calculado	28,35	1,96	1,37

Conclusões

Um novo cluster de estrutura polimérica constituída por gaiolas de adamantano (Se-Ph) foi sintetizado, e caracterizado por difração de raios-X em monocristal, e por técnicas complementares.

Agradecimentos

Ao CNPq e Fundect-MS pelo apoio financeiro.

[1]De Groot, M. W.; Taylor, N. J.; Corrigan, J. F. *Inorg. Chem.* **2005**, *44*, 5447.
[2]Casagrande, G. A.; Lang, E. S.; Oliveira, G. M.; Hörner, M.; Broch, F. *Inorg. Chim. Acta.* **2007,** 360, 1776.