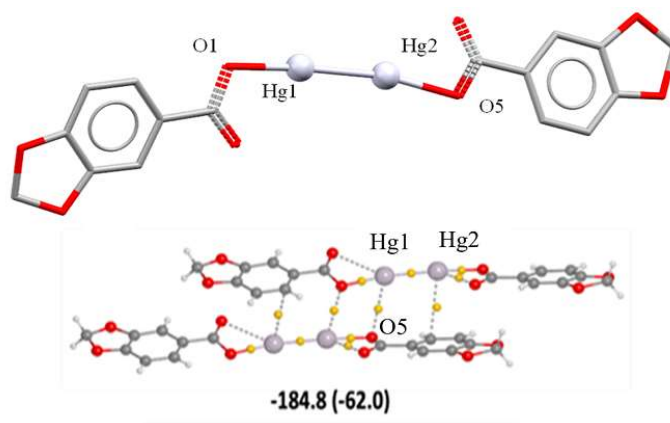


01/07/2022

La química de l'Hg (I): un estudi estructural



El Mercuri (Hg) és un metall capaç de formar diversos polications amb geometries diferents. En aquest treball de l'Àrea de Química inorgànica es presenta la síntesi i caracterització del $\text{Hg}_2(\text{Pip})_2$, un compost d'Hg (I) amb lligands aromàtics i grups carboxilats. La seva caracterització s'ha dut a terme mitjançant anàlisis elementals, tècniques espectroscòpiques, difracció de raigs X en monocristalls i càlculs DFT.

Estructura cristal·lina i energies d'interacció del dímer Hg(I) - Josefina Pons

El mercuri (Hg) és un metall que presenta la particularitat de formar una gran varietat de polications: divalents, trivalents o tetravalents, amb diferents geometries, linear, dímers $[\text{Hg}_2]^{2+}$, trímers $[\text{Hg}_3]^{2+}$, tetràmers $[\text{Hg}_4]^{2+}$, i cadenes $[\text{Hg}]_n$ o triangles $[\text{Hg}_3]^{4+}$. Tota aquesta gran varietat de geometries depenen de les condicions sintètiques, connectivitat i de la formació de l'enllaç Hg-Hg.

La formació de compostos que contenen el catió $[\text{Hg}_2]^{2+}$ s'estabilitza degut a la seva baixa solubilitat si es compara amb compostos anàlegs de Hg^{2+} . El fet que els compostos de Hg(I) tinguin preferència per l'estructura linear facilita las interaccions supra-moleculares $\text{Hg} \cdots \pi$.

La química de coordinació i la estructura de compostos de Hg(I) amb lligands aromàtics que contenen grups carboxilats han sigut poc estudiats fins el moment, i com a conseqüència hi ha pocs compostos d'aquests tipus descrits en la literatura.

En aquest treball, nosaltres presentem la síntesi i caracterització d'un compost d'aquesta família, $[\text{Hg}_2(\text{Pip})_2]$ (Pip = àcid piperonílic). L'obtenció d'aquest compost és deguda a la descomposició del compost $[\text{Hg}(\text{Pip})_2(4,4'\text{-bipy})]_n$ (4,4'-bipy = 4,4'-bipiridina) en presència de Hg(0), la presència de Hg(II) i Hg(0) porta a la formació del catió $[\text{Hg}_2]^{2+}$, que finalment permet obtenir el compost $[\text{Hg}_2(\text{Pip})_2]$. Aquesta reacció depèn del dissolvent (en aquest cas, dimetilformamida), temperatura (105 °C) i temps (1 h).

Aquest compost ha estat caracteritzat per anàlisis elementals, tècniques espectroscòpiques (IR, RMN de ^1H), monocristall i càlculs DFT. L'estructura d'aquest compost és un dímer i les unitats $[\text{Hg}_2(\text{Pip})_2]$ s'uneixen per formar un tetràmer $[\text{Hg}_4(\text{Pip})_4]$, degut als lligands Pip. L'estructura s'expandeix fins a formar una estructura supra-molecular 2D, degut a les interaccions C-H \cdots O i Hg \cdots π . Els càlculs DFT s'han fet amb la finalitat d'analitzar les interaccions entre els dímers $[\text{Hg}_2(\text{Pip})_2]$.

Josefina Pons

Departament de Química
Universitat Autònoma de Barcelona
josefina.pons@uab.cat

Referències

“A Hg(I) Corrugated sheet assembled by auxiliary dioxole groups and Hg \cdots π interactions” Francisco Sánchez-Férez, Xavier Solans-Monfort, Teresa Calvet, Mercè Font-Bardia, Josefina Pons, CrystEngComm, 2022, 24, 4351-4355

[View low-bandwidth version](#)