

SID



سرویس های ویژه



سرویس ترجمه تخصصی



کارگاه های آموزشی



بلاگ مرکز اطلاعات علمی



عضویت در خبرنامه



فیلم های آموزشی

کارگاه های آموزشی مرکز اطلاعات علمی جهاد دانشگاهی



PROPOSAL

پروپوزال

مركز آموزش پروپوزال نویسی و پایان نامه نویسی

کارگاه آنلاین پروپوزال نویسی و پایان نامه نویسی



مركز آموزش روش تحقیق و مقاله نویسی علوم انسانی

کارگاه آنلاین روش تحقیق و مقاله نویسی علوم انسانی



مركز آموزش آشنایی با پایگاه های اطلاعات علمی بین المللی و ترکیه های جستجو

کارگاه آنلاین آشنایی با پایگاه های اطلاعات علمی بین المللی و ترکیه های جستجو

بیستمین همایش بلورشناسی و کانی‌شناسی ایران

دانشگاه شهید چمران اهواز

۱۱ و ۱۲ بهمن ۱۳۹۱

تعیین ساختار کریستالی دو بعدی چارچوب آلی - جیوه (I) از لیگاند

۳- آمینو پیرازین - ۲ - کربوکسیلات و استات جیوه (II)

غفارزاده اناری، فرنوش^۱؛ محمودی، علی^۱؛ دهقانپور، سعید^{۲*}

۱ دانشکده علوم دانشگاه آزاد اسلامی واحد کرج

۲ دانشکده شیمی دانشگاه الزهرا

Farnooshghaffarzadeh@gmail.com

dehghanpour_farasha@yahoo.com

چکیده:

ساختار $[Hg_2(apca)_2]_n$ که در آن $\{apca = \text{لیگند } 3\text{-آمینو پیرازین-2-کربوکسیلات}\}$ می باشد به کمک کریستالوگرافی اشعه X تعیین شد. این ترکیب به صورت دو بعدی بوده که از دمبلهایی از جیوه و پل هایی از لیگند ۳-آمینوپیرازین-۲-کربوکسیلات تشکیل شده است. توپولوژی شبکه در این ترکیب (6^3) می باشد و با استفاده از پیوند هیدروژنی C-H...N به صورت ساختار سه بعدی ظاهر می شود. این ترکیب در ساختار مونوکلینیک متبلور شده و دارای ابعاد سلول واحد: $a = 7.3097(15)$ ، $b = 11.264(2)$ ، $c = 8.8025(18)$ و $\alpha = 90^\circ$ ، $\beta = 108.55(3)^\circ$ ، $\gamma = 90^\circ$

2D mercury(I)-organic framework Determination of Crystal Structures from 3-aminopyrazine-2-carboxylic acid and mercury(II) acetate

Ghaffarzadeh Anari, Farnoush¹; Mahmoodi, Ali¹; Dehghanpour, Saeed^{2*}

¹ Department of Science, Islamic Azad University Karaj Branch, Iran

² Department of Chemistry, Alzahra university, P.O.Box 1993891176, Tehran, Iran

Abstract

A new mercury(I)-organic framework based on Hg_2^{2+} dumbbell, $[Hg_2(apca)_2]_n$, **I**, $[apca = 3\text{-aminopyrazine-2-carboxylate}]$ have been characterized by single-crystal X-ray diffraction has shown a 2D-layer structure constructed from Hg_2^{2+} dumbbell and bridging 3-aminopyrazine-2-carboxylate, which features a (6^3) topological network. The 2D compound is further assembled by hydrogen bonds and C-H...N interactions into 3D supramolecular networks. Complex system is monoclinics with: $a = 7.3097(15)$ Å, $b = 11.264(2)$ Å, $c = 8.8025(18)$ Å and $\alpha = 90^\circ$ ، $\beta = 108.55(3)^\circ$ ، $\gamma = 90^\circ$

بیستمین همایش بلورشناسی و کانی‌شناسی ایران

دانشگاه شهید چمران اهواز

۱۱ و ۱۲ بهمن ۱۳۹۱

مقدمه

دارا بودن چندین محل کئوردیناسیون، کئوردینه نشدن گروه NH_2 و نگهداری آن برای مراحل بعدی سنتز [۱] و رفتار منحصر به فرد لیگاند ۳- آمینو پیرازین - ۲- کربوکسیلیک (Hapca) تحت شرایط هیدروترمال مانند واکنش اکسیداسیون - هیدرولیز [۲] از ویژگی‌های جالب این لیگاند هستند. [۳] و این ویژگی‌ها باعث می‌شوند که این لیگاند کاندیدای مناسبی برای سنتز چهارچوب‌های فلز-آلی باشند.

اگرچه تاکنون با فلزات قلیایی، قلیایی خاکی [۴]، برخی از فلزات واسطه [۵] و فلزات کمیاب با این لیگاند گزارش‌هایی شده است اما در این کار از دمبل‌هایی از Hg_2^{2+} در حضور مقدار اضافی از لیگاند نامبرده شده یک ساختار جدید دو بعدی تحت عنوان $[Hg_2(apca)_2]_n$ (ترکیب ۱) ساخته شده است. در این ترکیب apca لیگاند میباشد. [apca=3-aminopyrazine-2-carboxylate]

بحث و نتیجه‌گیری

ترکیب سنتز شده ۱ در ساختار مونوکلینیک و با گروه فضائی $P2_1/c$ متبلور می‌شود و در هر واحد نامتقارن آن یک یون جیوه (I) و یک لیگاند apca وجود دارد. (شکل ۱) که داده‌های کریستالوگرافی آن بشرح زیر می‌باشد:

جدول ۱: داده‌های کریستالوگرافی ترکیب ۱

سیستم کریستالی	مونو کلینیک
گروه فضایی	$P2_1/c$
ابعاد سلول واحد	$a=7.3097(15) \text{ \AA}$ $\alpha=90^\circ$ $b=11.264(2) \text{ \AA}$ $\beta=108.55(3)^\circ$ $c=8.8025(18) \text{ \AA}$ $\gamma=90^\circ$
حجم	$687.1(3) \text{ \AA}^3$
Z	۴
دانسیته	3.274 Mg/m^3
F(000)	۶۰۴
GOF	۱/۰۶۷
Final R indices [$I>2\sigma(I)$]	$R_1=0.0611$, $wR_2=0.1565$

میستین همایش بلورشناسی و کانی‌شناسی ایران

دانشگاه شهید چمران اهواز

۱۱ و ۱۲ بهمن ۱۳۹۱

جدول ۲- طول پیوندها (Å) و زوایای پیوندی انتخاب شده برای ترکیب ۱

Bond lengths	Å°
Hg(۱)-N(۱)	۲.۲۸۹(۷)
Hg(۱)-O(۱)	۲.۳۴۴(۷)
Hg(۱)-O(۲)	۲.۵۰۲(۶)
Hg(۱)-Hg(۱)#1	۲.۵۰۶۴(۹)
Bond angles	°
N(۱)-Hg(۱)-O(۱)	۷۱.۲(۲)
N(۱)-Hg(1)-O(۲)	۷۱.۹(۲)
O(۱)-Hg(۱)-O(۲)	۸۴.۹(۳)
N(۱)-Hg(۱)-Hg(۱)#۱	۱۴۵.۴۲(۱۶)
O(۱)-Hg(۱)-Hg(۱)#۱	۱۳۶.۱۵(۱۵)
O(۲)-Hg(۱)-Hg(۱)#۱	۱۲۲.۳۶(۱۸)
C(۱)-O(۱)-Hg(۱)	۱۱۷.۳(۵)
C(۵)-N(۱)-Hg(۱)	۱۲۲.۷(۶)
C(۲)-N(۱)-Hg(۱)	۱۱۶.۶(۵)

همانطور که در شکل یک نشان داده شده است، در اطراف هر اتم جیوه چهار اتم وجود دارد، که شامل یک اتم جیوه دیگر، یک اتم نیتروژن، یک اتم اکسیژن از لیگاند و یک اتم اکسیژن دیگر متعلق به لیگاند مجاور آن می‌باشد. اتم جیوه دارای ژئومتری هرم مثلثی انحراف یافته است، که صفحه اصلی با کئوردینه شدن اتم $Hg(1)\#1$ به اتمهای $N(1)$ و $O(1)$ ساخته می‌شود. اتم $Hg(1)$ با فاصله $۰/۳۲۶۵$ آنگستروم دورتر از صفحه اصلی قرار می‌گیرد. و موقعیت رأس را $O(2)$ اشغال کرده است که فاصله آن با اتم $Hg(1)$ ، $۲/۵۰۲(۶)$ آنگستروم می‌باشد، که این طول پیوند بطور کاملاً واضحی از فاصله آن با $O(1)$ با طول پیوند $۲/۳۴۴(۷)$ آنگستروم بلندتر است.

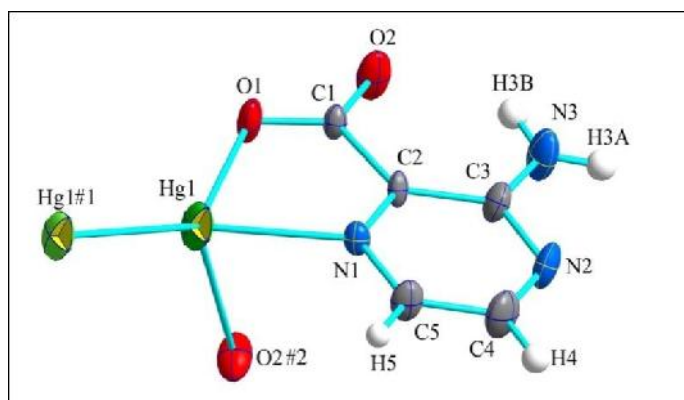
جمع زوایای پیوندی اطراف اتم جیوه در صفحه اصلی $۳۵۲/۸$ درجه می‌باشد. و طول پیوند دو اتم جیوه در این ترکیب $۲.۵۰۶۴(۹)$ آنگستروم است، که می‌توان آن را با طول پیوند دو اتم جیوه در ترکیب $Hg_2(phen)_2(OTf)_2$ که برابر $۲/۵۳۱(۵)$ Å و همچنین با طول دو پیوند جیوه در ترکیب $Hg_2(phen)(NO_3)_2$ که برابر $۲/۵۱۶(۷)$ Å و همچنین طول دو پیوند جیوه در ترکیب $[Hg_2(4-bromophenyl)pyridin-2-ylmethyleneamine]_2(NO_3)_2$ که برابر $۲.۵۳۳(۱۱)$ Å می‌باشد مقایسه نمود.

بیستمین همایش بلورشناسی و کانی‌شناسی ایران

دانشگاه شهید چمران اهواز

۱۱ و ۱۲ بهمن ۱۳۹۱

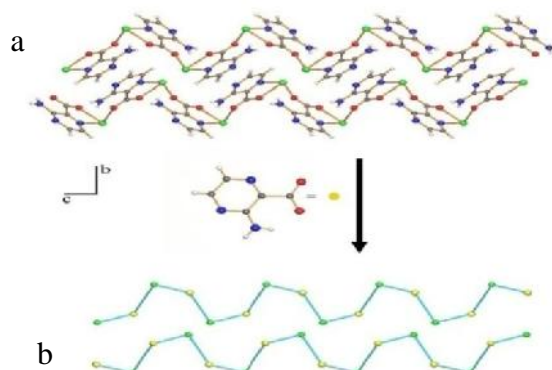
در این ترکیب گروه کربوکسیلات لیگاند apca بصورت پلساز عمل کرده و بصورت پل بین دو اتم Hg^{2+} قرار می‌گیرد، و یک زنجیره زیکرایی نامحدود را تشکیل می‌دهد که جهت گیری آن مخالف لیگاندهای apca در زنجیره مجاور است.



شکل ۱- محیط کئوردیناسیونی اطراف اتم جیوه در ترکیب $[Hg_2(apca)_2]_n$

در شکل ۲ نیز همانطور که نشان داده شده است زنجیره‌ها با هم موازی هستند و در راستای محور C کریستالوگرافی گسترش یافته‌اند.

و هر لیگاند apca با لیگاند دیگر در زنجیره مجاورش دارای زاویه $(2) 85.1$ درجه می‌باشد. و در نتیجه پیوند بین $Hg-Hg$ زنجیره‌ها بیشتر به یکدیگر متصل شده و تشکیل یک شبکه سه بعدی را می‌دهند که توپولوژی شبکه در این ترکیب (6^3) می‌باشد.



شکل ۲- (a) نمایش زنجیره‌ی یک بعدی گسترش یافته در راستای محور C کریستال گرافی اتم جیوه (سبز)، اکسیژن (آبی)، کربن (خاکستری) (b) نشان دهنده زنجیره‌ی یک بعدی ساده که در آن اتم‌های جیوه و لیگاندهای apca به صورت توپهای سبز و زرد نشان داده شده‌اند.

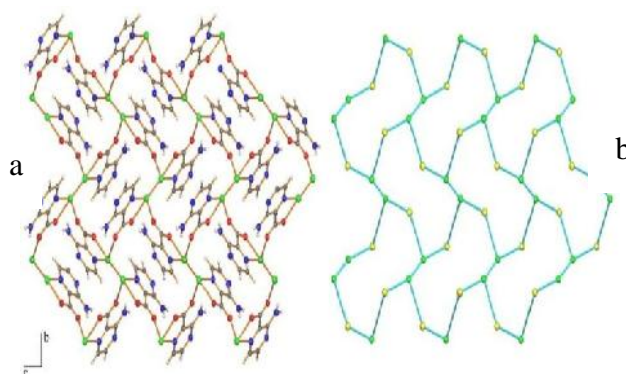
بیستمین همایش بلورشناسی و کانی‌شناسی ایران

دانشگاه شهید چمران اهواز

۱۱ و ۱۲ بهمن ۱۳۹۱

همانطور که در شکل ۳ مشخص شده است، هر صفحه شامل حلقه‌های هیجده عضوی میباشد، که حلقه‌ها از طریق پیوند درون مولکولی بین $N3-H3B...O2$ و همچنین پیوند هیدروژنی بین: $(N3-H3B=0.86\text{\AA}, H3B...O2=2.05\text{\AA}, N3...O2=2.688(10)\text{\AA}, \angle N3-H3B...O2=129.9$ یکدیگر متصل می‌شوند.

نوع دیگر پیوند هیدروژنی درون مولکولی نیز بصورت زیر است: $(N3-H3A...O1) (N3-H3A=0.86\text{\AA}, H3A...O1=2.27\text{\AA}, N3...O1=3.105(10)\text{\AA}, \angle N3-H3A...O1=164.0^\circ)$ که صفحات متقارن مجاور را به یکدیگر متصل می‌کند بطوریکه ایجاد یک ساختار سوپرا-مولکولی سه بعدی می‌نماید.



شکل ۳- (a) شبکه دو بعدی گسترش یافته در طول صفحه ab

(b) شبکه‌ی دو بعدی ساده شده که در آن اتم جیوه (سبز)، اکسیژن (آبی)، کربن (خاکستری) می‌باشد.

مراجع

- [1] A.D. Burrows, C.G. Frost, M.F. Mahon, C. Richardson, Post-Synthetic Modification of Tagged Metal–Organic Frameworks, *Angew. Chem. Int. Ed.* **47** (2008) 8482–8486.
- [2] Z.P. Deng, W. Kang, L.H. Huo, H. Zhao, S. Gao, Rare-earth organic frameworks involving three types of architecture tuned by the lanthanide contraction effect: Hydrothermal syntheses, structures and luminescence, *Dalton Trans.* **39** (2010) 6276–6284.
- [3] A.J. Dobson, R.E. Gerkin, 3-Aminopyrazine-2-carboxylic Acid, *Acta Cryst. C.* **52** (1996) 1512–1514.
- [4] (a) J. Leciejewicz, H. Ptasiwicz-Bak, B. Paluchowska, Molecular ribbons composed of calcium atoms bridged by carboxylate oxygens in the X-ray structure of calcium complex with 3-aminopyrazine-2-carboxylic acid, *Pol. J. Chem.* **71** (1997) 1359–1364.
(b) J. Leciejewicz, H. Ptasiwicz-Bak, J. Zachara, The crystal structure of strontium complex with 3-aminopyrazine-2-carboxylic acid, *Pol. J. Chem.* **72** (1998) 1994–1998.
(c) R. Tayebee, V. Amani, H.R. Khavasi, Supramolecular architecture from a sodium coordination polymer with a 3D net containing 3-aminopyrazine-2-carboxylic acid (APZC): synthesis, characterization and crystal structure of $[Na_2(APZC)_2(\mu-H_2O)_2(\mu_3-H_2O)]_n$, *Chin. J. Chem.* **26** (2008) 500–504.
- [5] I.M. Gabr, H.A. El-Asmy, M.S. Emmam, S.I. Mostafa, Synthesis, characterization and anticancer activity of 3-aminopyrazine-2-carboxylic acid transition metal complexes, *Transition Met. Chem.* **34** (2009) 409–418.

Email: farnooshghaffarzadeh@gmail.com

Chem- 34 = مقاله

SID



سرویس های ویژه



سرویس ترجمه تخصصی



کارگاه های آموزشی



بلاگ مرکز اطلاعات علمی



عضویت در خبرنامه



فیلم های آموزشی

کارگاه های آموزشی مرکز اطلاعات علمی جهاد دانشگاهی



PROPOSAL
پروپوزال

پروپوزال نویسی و پایان نامه نویسی

دکتره تهرانی

کارگاه آنلاین
پروپوزال نویسی و پایان نامه نویسی



روش تحقیق و مقاله نویسی علوم انسانی

دکتره تهرانی

کارگاه آنلاین
روش تحقیق و مقاله نویسی علوم انسانی



ISI
Scopus

آشنایی با پایگاه های اطلاعات علمی بین المللی و ترند های جستجو

دکتره تهرانی

کارگاه آنلاین آشنایی با پایگاه های اطلاعات علمی بین المللی و ترند های جستجو