

Synthèse, étude structurale et analyse des surfaces Hirshfeld d'un nouveau complexe de coordination à base de HgII et tétrazole-2-pyridyl.

Belkis Selsabil YEDDIOU (Université Frères Mentouri - Constantine 1, Unité de Recherche de Chimie de l'Environnement et Moléculaire Structurale CHEMS, Campus Ahmed Hammani, 25000, constantine, Algeria.)

Mohamed Abdellatif BENSEGUENI (Université Frères Mentouri - Constantine 1, URCHEMS Campus Ahmed Hammani, 25000, Constantine - Algeria)

Abstract

Les tétrazoles et leurs dérivés suscitent un intérêt croissant en chimie de coordination et supramoléculaire en raison de leur capacité à fournir des sites de coordination multiples d'une part et de jouer le rôle des accepteurs de liaisons hydrogène d'autre part. Cette attention est motivée par la formation de complexes supramoléculaires dotés de structures fascinantes avec des propriétés physicochimiques intéressantes. Actuellement, la recherche se concentre sur l'auto-assemblage pour la construction de ces complexes supramoléculaires, où les liaisons hydrogène jouent un rôle central en agissant comme une force organisatrice.

La structure cristalline du complexe (I) : $[\text{Hg}(\text{L})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ formé par HL: tétrazole-2-pyridyle étudiée dans cette étude, illustre ces principes. Dans ce complexe, l'atome de HgII est hexacoordonné, se liant à la fois à des atomes d'oxygène provenant de molécules d'eau de coordination et à des donneurs d'atomes de N provenant de ligands L chélatants. Les interactions intermoléculaires telles que les liaisons hydrogène et les empilements ? contribuent à la formation d'un réseau tridimensionnel.

Cette structure cristalline contient également des interactions intermoléculaires de type empilement I en plus des liaisons hydrogène de type O-H...N (Desiraju & Steiner, 1999) présentant une contribution de H..N/N..H de 30%, entre les ligands L et les molécules d'eau

coordonnées qui relient les couches bidimensionnelles pour former un cadre supramoléculaire tridimensionnel. La contribution la plus importante est celle des contact H..H de ~36%, les autres contributions de type C..C, N..N et C..N/N..C de ~ 20% confirme le rôle des interactions intermoléculaires de type empilement I dans la cohésion de la structure cristalline (Spackman *et al*,2021).