

COMPLEJOS MOLECULARES  $\text{PF}_5$  - ACETONITRILO

**Agustín Spaltro,<sup>1</sup> Marcos I. Leone,<sup>1</sup> Rosana M. Romano,<sup>1</sup> Carlos O. Della Védova,<sup>1</sup>  
Holger Pernice,<sup>2</sup> Sebastian Hasenstab-Riedel<sup>2</sup>**

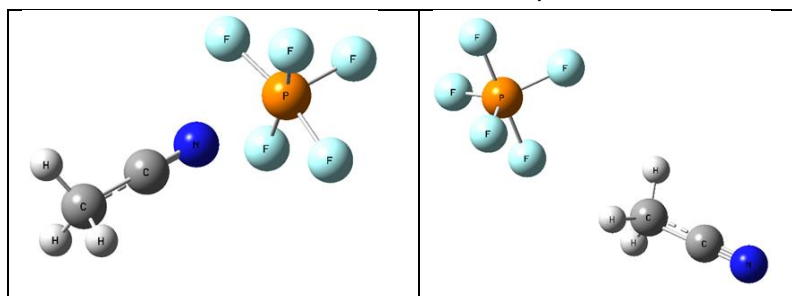
<sup>1</sup> CEQUINOR (UNLP, CCT-CONICET La Plata, asociado a CIC-PBA). Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional de La Plata. Boulevard 120 N° 1465, La Plata (1900), Argentina; <sup>2</sup> Institut für Chemie und Biochemie – Anorganische Chemie, Freie Universität Berlin, Alemania.

Correo electrónico de contacto: [aspaltro@quimica.unlp.edu.ar](mailto:aspaltro@quimica.unlp.edu.ar)

Dentro del desarrollo en la producción de sales para electrolitos de baterías ión-Li, el  $\text{LiPF}_6$  (hexafluorofosfato de litio) es el más ampliamente utilizado ya que proporciona una buena temperatura de funcionamiento y una gran conductividad iónica. Su síntesis puede llevarse a cabo bajo diferentes modalidades<sup>1</sup>. Uno de estos métodos, que no resulta el más eficiente, conlleva el uso de dos reactivos como  $\text{PF}_5(\text{g})$  (pentafluoruro de fósforo) y  $\text{CH}_3\text{CN}$  (acetonitrilo), sustancias de toxicidad elevada pero que no son corrosivas cuando se los manipula en condiciones seguras. Estas dos especies presentan propiedades químicas muy diferentes, ya que el  $\text{PF}_5$  hidroliza fácilmente, formando  $\text{HF}$  y  $\text{OPF}_3$ , mientras el  $\text{CH}_3\text{CN}$  es un solvente conocido por su inercia química, por lo que puede resultar interesante el estudio tanto de su interacción como de su posible reacción.

Se ha encontrado, que estas dos especies tienen la posibilidad de formar complejos moleculares, observados mediante la técnica de aislamiento en matrices de gases inertes a temperaturas criogénicas, junto con espectroscopía FTIR, donde pueden verse la aparición de nuevas bandas que no pueden ser atribuidas a los monómeros aislados.

Estos complejos moleculares pueden adoptar diferentes geometrías, producto de distintas interacciones entre los átomos. Las posibles estructuras fueron encontradas mediante Docking



**Figura 1.** Complejos moleculares  $\text{PF}_5:\text{CH}_3\text{CN}$  optimizados con la aproximación B87M-V def2QZVPPD.

molecular usando el método semi-empírico GFN2-xTB, desarrollado para cálculos rápidos y precisos de las propiedades electrónicas y estructurales de complejos moleculares. Las estructuras encontradas fueron optimizadas mediante los métodos B97M-D4 y B97M-V con la base def2-QZVPPD utilizando el software libre Orca 6.0. Los mínimos encontrados se pueden observar en la Figura 1.

**Agradecimientos.** Al CONICET (PUE-22920170100053CO y PIP-342), la UNLP (UNLP-11/X822) y la ANPCyT (PICT-2018-4355 y 2020-3746) por el apoyo financiero.

Este trabajo utilizó recursos computacionales del CCAD de la Universidad Nacional de Córdoba (<https://ccad.unc.edu.ar/>), que forman parte del SNCAD del MinCyT de la República Argentina.

### Referencias

[1] Susarla, N., Ahmed, S., *Ind. Eng. Chem. Res.*, **2019**, 58, 3754.