

Estudo supramolecular energético e topológico de três N-(3-Clorofenil)-Bromobenzamidas

PE06200620/045

Sergio André Pires (Discente - IFSul Câmpus Pelotas – Engenharia Química – spires93@gmail.com)

Patrick Teixeira Campos (Docente Orientador - IFSul Câmpus Pelotas – Engenharia Química – patrickcampos@pelotas.ifsul.edu.br)

Câmpus Pelotas

INTRODUÇÃO

Como as moléculas se agregam em solução para formar um cristal e qual é a relação entre a estrutura molecular e cristalina são algumas das grandes questões da Engenharia de cristais.¹ Diversos estudos nessa área vem propondo uma grande variedade de perspectivas para um melhor entendimento desse processo.^{2,3}

OBJETIVO

O objetivo desse trabalho foi realizar um estudo energético e topológico das interações intermoleculares presentes nos cristais de três N-(3-Clorofenil)-Bromobenzamidas, com bromo nas posições orto, meta e para. E assim determinar as energias que envolvem a primeira esfera de coordenação, propondo um processo de nucleação.

METODOLOGIA

A partir dos arquivos .CIF obtidos do banco de dados do CCDC, foram determinados os parâmetros topológicos como MCN e área de contato dos compostos usando o software TOPOS®. Dados de energia foram calculados usando o software ORCA4® e imagens do cluster evidenciando interações intermoleculares foram geradas pelo software MERCURY®.

APRESENTAÇÃO E DISCUSSÃO DOS RESULTADOS

Os três compostos apresentaram um MCN igual a 16. As energias totais das interações na primeira esfera de coordenação variaram entre: -297.64 e -312.46 kcal.mol⁻¹. O somatório das áreas de contato entre as moléculas do cluster ficaram entre: 318.42 e 327.20 Å². Tomando o composto com X=orto como exemplo temos a **TABELA 1** com as energias de interação ($G_{C_{M1...Mn}}$) em Kcal.mol⁻¹ e superfícies de contato ($C_{M1...Mn}$) em Å² entre a molécula central (M1) e vizinhas (Mn). Assim foram propostas etapas para a nucleação de forma que interações intermoleculares com maior energia estabilizante tendam a ocorrer antes que interações menos robustas.

Tabela 1

Dímero	Interação	$G_{C_{M1...Mn}}$	$C_{M1...Mn}$
M1...M2	Cl1...Br1	-0.25	5.51
M1...M3	C11-H11...O1	-5.79	22.00
M1...M4	C12-H12...Br1 H11...H2	-3.05	23.35
M1...M5	C11-H11...Cl1	-1.51	11.35
M1...M6	H11...H2 C12-H12...Br1	-3.05	23.35
M1...M7	C3-H3...Cl1	-2.97	15.55
M1...M8	C4-H4...O1 C3-H3...Cl1	-4.18	25.96
M1...M9	C11-H11...Cl1	-1.74	11.35
M1...M10	C3-H3...Cl1	-2.97	15.55
M1...M11	N1-H1...O1 C5-H5... π $\pi B... \pi B$ (T)	-14.82	50.93
M1...M12	C10-H10...Cl1	-0.90	6.42
M1...M13	C11-H11...O1 N1-H1...O1	-5.79	22.00
M1...M14	C5-H5... π $\pi B... \pi B$ (T)	-14.83	50.93
M1...M15	Cl1...Br1	-0.25	5.51
M1...M16	C4-H4...O1 C3-H3...Cl1	-4.18	25.96
M1...M17	C10-H10...Cl1	-0.90	6.42

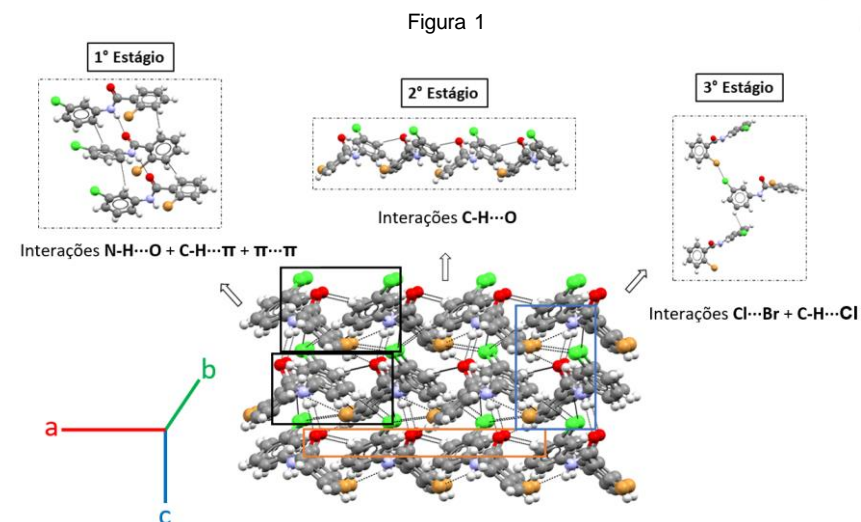
Dessa maneira o primeiro estágio da nucleação é ilustrado pela **FIGURA 1** e ocorre pela formação de interações do tipo N-H...O juntamente com $\pi... \pi$ e C-H... π . No segundo estágio da nucleação é apresentada a segunda energia mais forte de todo o cluster, com interações C-H...O + C-H...Cl ocorrendo de maneira simultânea e com o crescimento ao longo do eixo c. No terceiro estágio devem ocorrer fracas interações intermoleculares entre os halogênios Cl...Br, ao longo do eixo de crescimento b. Assim observamos a ocorrência do crescimento ao longo dos três eixos a, b e c.

14^o
JIC
IFSul

JORNADA DE
INICIAÇÃO CIENTÍFICA DO
INSTITUTO FEDERAL SUL-RIO-GRANDENSE

2021

INSTITUTO
FEDERAL
Sul-rio-grandense



CONCLUSÃO

A partir dos dados obtidos do estudo energético e topológico dos compostos, determinou-se as energias envolvidas na primeira esfera de coordenação bem como as interações intermoleculares de governam o empacotamento cristalino. Dessa forma foi proposto um processo de nucleação para a formação do cristal.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. G. R. Desiraju, *J. Am. Chem. Soc.*, 2013, 135, 9952–9967.
2. Desiraju, G. R. *Crystal Engineering: A Holistic View*. *Angew. Chem., Int. Ed.* 2007, 46, 8342–8356.
3. Desiraju, G. R. *Crystal Engineering: From Molecule to Crystal*. *J. Am. Chem. Soc.* 2013, 135, 9952–9967.

CNPq
Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico

REALIZAÇÃO
propesp

INSTITUTO FEDERAL
Sul-rio-grandense