

Introdução

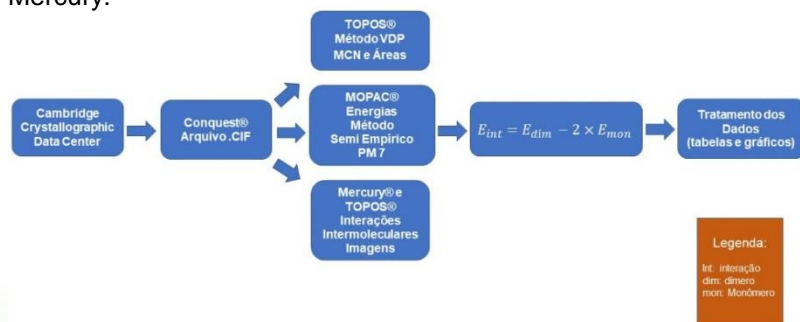
A engenharia do cristal visa explicar a formação dos cristais. Um grande conhecimento das interações envolvidas no cluster pode significar a obtenção de sólidos com características conhecidas¹. Por meio de estudos de energia e topologia do cristal, sua rota de formação pode ser sugerida².

Objetivo

O objetivo da pesquisa foi o estudo supramolecular de 12 ácidos carboxílicos mono aril mono halogenados (F, Cl, Br, I).

Metodologia

A metodologia empregada no desenvolvimento da pesquisa foi aplicando a sequencia de etapas do fluxograma abaixo utilizando os programas Conquest, TOPOS, MOPAC e Mercury:



Além de medições das áreas e energias entre as moléculas do cluster, o estudo também identificou as Interações moleculares envolvidas, como se observa nas figuras a seguir.

Apresentação e Discussão dos Resultados

Para exemplificar o trabalho desenvolvido na figura 1, temos as interações do composto orto-clorado apresentando as ligações de hidrogênio fortes entre M1...M2 com energia de estabilização de -14,67 kcal/mol. Já para uma fraca ligação de hidrogênio como M1...M6 (O2...H5-C5/Cl1...H5-C5) a energia de estabilização é de -3,97 kcal/mol.

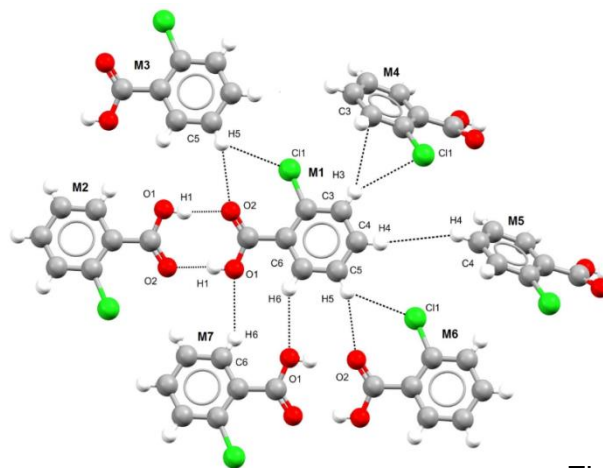


Figura 1

Na figura 2, Temos a sugestão de uma rota de cristalização. O estágio 1 se configura pela interação de maior energia de estabilização de -17,12 kcal/mol. Os estágios posteriores se configuram pela diminuição da energia de estabilização, até chegar ao estágio 6, interação de maior valor energético -1,09 kcal/mol.

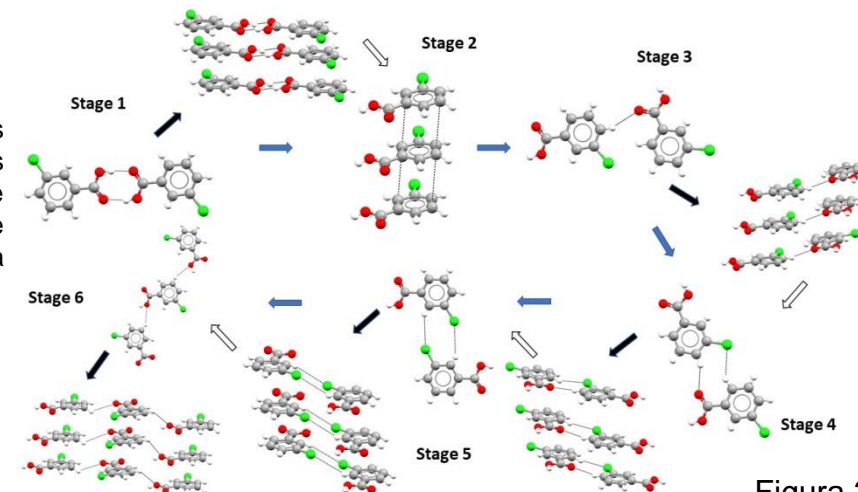


Figura 2

Conclusão

Foi verificado quais interações intermoleculares estavam presentes no empacotamento cristalino nas diferentes estruturas supramoleculares em todos os compostos. Além disso, foi determinado os dados de energia de estabilização das interações. Adicionalmente, foi sugerido quais interações governam o empacotamento cristalino afim de propor uma rota de cristalização

- Clarissa P. Frizzo, Aniele Z. Tier, Izabelle M. Gindri, Alexandre R. Meyer, Gabrielle Black, Andrei L. Belladonna, Marcos A. P. Martins CrystEngComm, 2015, 17, 43253: RSC Adv., 2014, 4, 44337.
- M. A. P. Martins, C. P. Frizzo, A. C. L. Martins, A. Z. Tier, I. M. Gindri, A. R. Meyer, H. G. Bonaccorso and N. Zanatta, RSC Adv., 2014, 4, 44337.

REALIZAÇÃO: