

# Estudo Supramolecular de três novas 4-bromo-*N*-(clorofenil)benzamidás

PE06200620/045

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

Vanessa Uecker Krüger (Discente – IFSul Câmpus Pelotas – Engenharia Química – vanessaukruger@yahoo.com.br)

Luiza Pereira Afonso (Discente Colaborador - IFSul Campus Pelotas – Engenharia Química – luizaafonso@hotmail.com)

Pelotas

14<sup>o</sup>  
JIC  
IFSul

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

2021



## Introdução

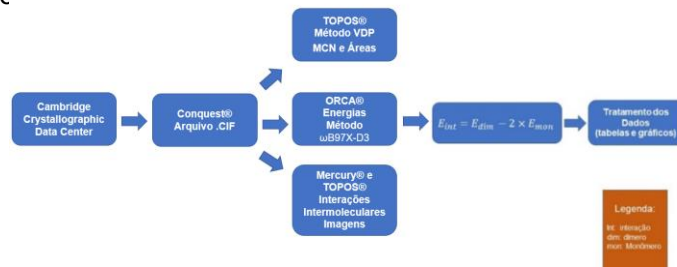
A formação do cristal é muito importante dentro da engenharia de cristais.<sup>1</sup> O processo de nucleação é o primeiro passo na formação de uma nova fase termodinâmica ou de uma nova estrutura via auto-montagem ou auto-organização.<sup>2</sup>

## Objetivo

O objetivo da pesquisa foi o estudo supramolecular de três novas 4-bromo-*N*-(clorofenil)benzamidás variando a posição do cloro (*orto*, *meta* ou *para*) no benzeno.

## Metodologia

A metodologia empregada no desenvolvimento da pesquisa segue a sequência de etapas do esquema abaixo utilizando os prc



Além disso as superfícies de contato entre as moléculas na primeira esfera de coordenação foram adquiridos, com o intuito de auxiliar na proposta de um caminho para o processo de nucleação. Além disso foi obtida a energia das interações intermoleculares, que envolve a molécula central, a energia resultante das moléculas periféricas e a energia total do aglomerado proporcionada por todas interações, como se observa nas figuras a seguir.

## Apresentação e Discussão dos Resultados

Dois compostos apresentaram MCN igual a 16 e o outro MCN igual a 14 moléculas o que foi exemplificado na Figura 1 com o composto *o-cl* e *p-br*. A energia total das interações intermoleculares no cluster varia de -263.41 a -309.51 kcal/mol.

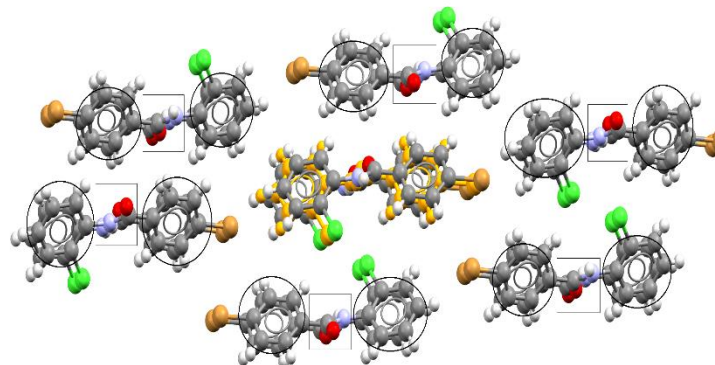


Figura 1

Considerando a ordem decrescente de energia das interações intermoleculares das amidás diaril dihalogenadas nós propomos como ocorreria o processo de nucleação na formação do cristal. O composto *o-cl* e *para-bromo* substituído foi usado como exemplo como mostrado na Figura 2. O primeiro estágio ocorre com a formação da interação intermolecular N-H...O com energia de estabilização de -13,59 kcal/mol. O segundo estágio deve ocorrer com a interação intermolecular na forma de dímero por vezes C-H...O com energia de estabilização de -5,55 kcal/mol. O terceiro estágio deve ocorrer com a interação intermolecular C-H...Br com energia de estabilização de -1,88 kcal/mol.

Esses três estágios sugerem o crescimento do cristal nas três direções. A união de moléculas leva a formação de blocos até a formação do cristal.

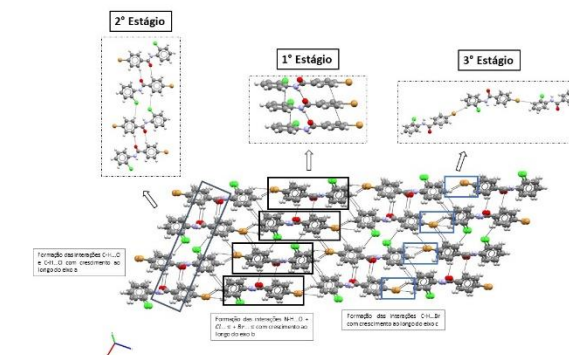


Figura 2

## Conclusão

Nós verificamos quais interações intermoleculares governam o empacotamento cristalino nas estruturas supramoleculares de três novas amidás diaril dihalogenadas. Determinamos os dados de energia de estabilização das interações no cluster como um todo. Adicionalmente, propomos como ocorreria a nucleação nessa classe de compostos conforme a energia das interações.

## Referências Bibliográficas

- Campos, P.T.; Rosa, B.F.C.; Saija, H.H.; Milani, M.A.; Krüger, V.U. Supramolecular Energetic and Topological Study of Halogenated Aryl Carboxylic Acids. *Cryst. Growth Des.*, **2020**, 20, 10, 6382–6399.
- Sear, R. P. Nucleation: theory and applications to protein solutions and colloidal suspensions. *J. Phys.: Condens. Matter.* **2007**, 19, 1-28.

CNPq

FAPERGS  
Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado do Rio Grande do Sul

propesp

INSTITUTO FEDERAL  
Sul-rio-grandense