

Estudo supramolecular de N-(2-Clorofenil)-benzamidás Bromadas através de dados topológicos e energéticos

PE06200620/045

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

Gabriel Machado Rodrigues (Discente - IFSul Câmpus Pelotas – Engenharia Química – gabrielrodrigues.pl121@academico.ifsul.edu.br)

Campus Pelotas

14^o
JIC
IFSul

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

INSTITUTO
FEDERAL
Sul-rio-grandense

2021

Introdução

O uso de dados computacionais para a determinação das propriedades de cristalinas de compostos químicos tem sido de grande interesse para a comunidade científica¹ e vem demonstrando grande importância para o desenvolvimento de novos medicamentos e o combate de novas doenças².

Objetivo

O Objetivo deste trabalho foi calcular e interpretar os dados energéticos e topológicos para os compostos N-(2-Clorofenil)-benzamidás bromadas nas posições Orto, Meta ou Para.

Metodologia

Para determinar a área e energia de interação foram utilizados os Softwares TOPOS, ORCA e Mercury. As superfícies de contato entre as moléculas na primeira esfera de coordenação ($G_{\Sigma iiM1}$) e a energia total do aglomerado (G_{tiic}) foram adquiridos, com o intuito de buscar uma relação entre estes dados e a densidade experimental dos cristais. Além disso foi obtida a energia das interações intermoleculares, que envolve a molécula central ($G_{\Sigma iiM1}$) e a energia resultante das moléculas periféricas (G_{tiipcc}).

Apresentação e Discussão dos Resultados

Através dos dados da tabela 1 é possível observar algumas tendências como por exemplo a maior energia é do composto Orto devido a presença de duas moléculas a mais no aglomerado Enquanto a densidade se mostra inversamente

Composto	Densidade [g/cm ³]	G _{tiic} Kcal/mol	G _{ΣiiM1} Kcal/mol	MCN	G _{tiipcc} Kcal/mol	C _{ΣiiM1} [Å ²]
Orto	1.66	-284.64	-71.06	16	-213.59	316.98
Meta	1.72	-264.76	-70.29	14	-194.47	302.22
Para	1.683	-263.41	-68,30	14	-195.1	314.34

Tabela 1

proporcional a área de contato da primeira esfera de coordenação e a razão (G_{tiic}/MCN). Estas tendências podem ser explicadas pelo fato de que a energia de estabilização mais forte reduz as distâncias intermoleculares fazendo assim um cristal mais compacto e, portanto, mais denso.

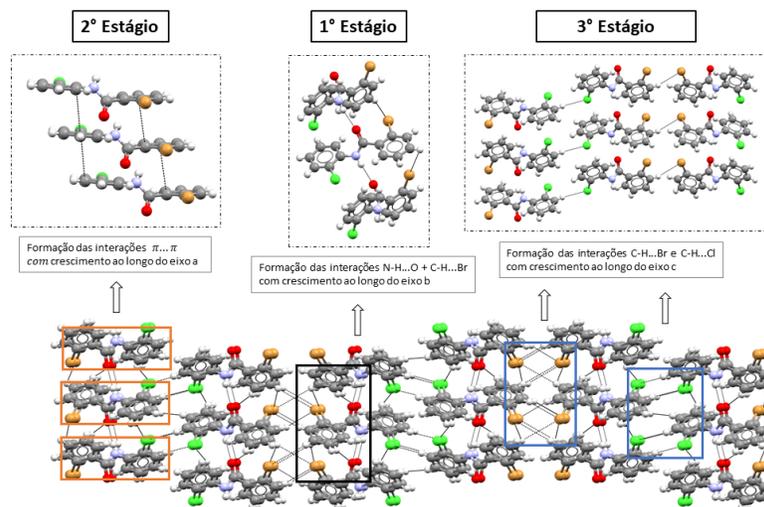


Figura 1

Considerando a ordem decrescente de energia estabilizantes das interações intermoleculares das amidás dihalogenadas nós propomos como ocorreria o processo de nucleação na formação do cristal. O composto N-(2-Clorofenil)-2-Bromobenzamida foi usado como exemplo como mostrado na Figura 1.

O primeiro estágio ocorre com a formação da interação intermolecular N-H...O em conjunto com a interação C-H...Br com energia de estabilização de -12,76 kcal/mol e crescimento ao longo do eixo B. O segundo estágio deve ocorrer com a formação da interação intermolecular $\pi\cdots\pi$ com energia de estabilização de -8,27 kcal/mol promovendo crescimento no eixo A. O terceiro estágio deve ocorrer com as interações intermoleculares C-H...Br e C-H...Cl com energia de estabilização de -2,14 e -2,60 kcal/mol respectivamente

Conclusão

Nós verificamos quais interações intermoleculares governam o empacotamento cristalino nas estruturas supramoleculares de três N-(2-Clorofenil)-Bromobenzamidás. Determinamos os dados de energia de estabilização das interações no cluster como um todo e encontramos relações com sua densidade. Adicionalmente, propomos como ocorreria a nucleação nessa classe de compostos conforme a energia das interações.

Referências Bibliográficas

1. TEIXEIRA CAMPOS, P. et al. Supramolecular Energetic and Topological Study of Halogenated Aryl Carboxylic Acids. *Crystal Growth & Design*, v. 20, n. 10, p. 6382–6399, 7 out. 2020.
2. ZIMMERMAN, M. I. et al. SARS-CoV-2 simulations go exascale to predict dramatic spike opening and cryptic pockets across the proteome. *Nature Chemistry*, v. 13, n. 7, p. 651–659, jul. 2021.