

ANÁLISE ESTRUTURAL DO EMPACOTAMENTO CRISTALINO DE AMIDAS ARIL HALOGENADAS

PE06180818/136

Henrique Saija Hilsinger (Discente - IFSul Câmpus Pelotas – Engenharia Química – henriquesaijahilsinger@gmail.com)
 Marcéo Auler Milani (Docente Orientador - IFSul Câmpus Pelotas – Técnico em Química – marceomilani@pelotas.ifsul.edu.br)
 Patrick Teixeira Campos (Docente Colaborador - IFSul Câmpus Pelotas – Engenharia Química – patrickcampos@ifsul.edu.br)
 Bruno Felipe Cunha da Rosa (Discente Colaborador - IFSul Câmpus Pelotas – Engenharia Química – brunofelipecdr@gmail.com)
 Luiza Pereira Afonso (Discente Colaborador - IFSul Câmpus Pelotas – Engenharia Química – luizaafonso@gmail.com)
 Vanessa Ucker Kruger (Discente Colaborador - IFSul Câmpus Pelotas – Engenharia Química – vanessaukruger@yahoo.com.br)

Pelotas

Introdução

Uma das grandes dúvidas da Engenharia de Cristais, é como as moléculas se agregam em uma solução para formarem um cristal, e uma forma para começar a entender desse assunto, é estudar a influência da molécula no processo de cristalização.

Objetivo

Para isto, este trabalho visa analisar algumas características de 12 amidas aril halogenadas (Figura 1) e do seu cristal, além de elaborar uma possível rota para a sua formação.

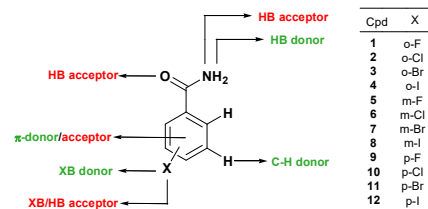


Figura 1

Metodologia

Através de softwares conhecidos na área da química computacional, utilizou-se métodos que possibilitam determinar dados como, energia de estabilização, áreas superficiais dos compostos e áreas de contato entre interações, além da possibilidade de compreender a quantidade de moléculas em cada cluster.

Discussão de Resultados

Com este estudo, foi possível subdividir as interações em 4 tipos, sendo estas separadas por energia de interação e sua área de contato, é possível observar que as interações de Tipo 2, que são as que envolvem altas energias de interação e

grande superfície de contato, formam 29% das interações (Figura 1).

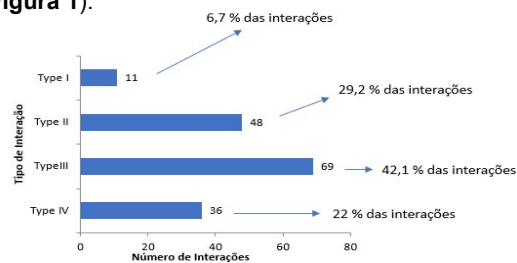


Figura 2

Embora as interações do Tipo 2 representem menos de um terço das interações presentes, 55% da energia de estabilização provem delas (Figura 3)

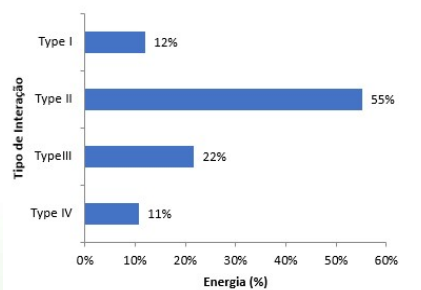


Figura 3

Com os dados de energia obtidos para a interação do composto central com cada um de seu cluster, foi possível elaborar uma possível rota de cristalização da primeira esfera de coordenação (Figura 4).

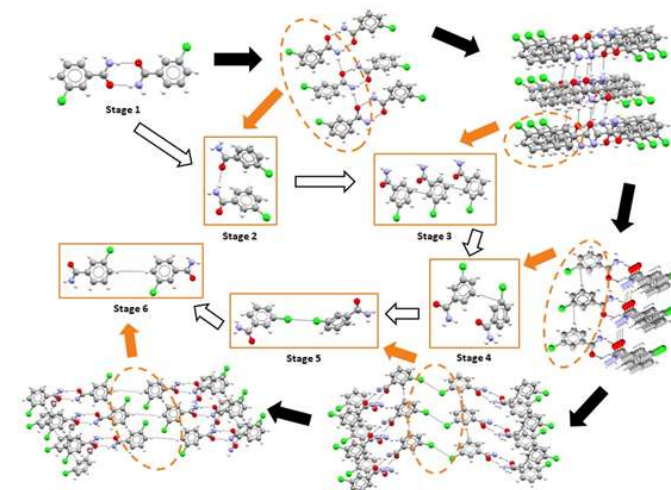


Figura 4

Conclusão

Estes compostos possuem a tendência de formar interações π - π e ligações de hidrogênio, além de interações via σ -hole, portanto, estes se tornam bons compostos para estudo de interações.

Referências

Seth, S. K.; Saha, I.; Estarellas, C.; Frontera, A.; Kar, T.; Mukhopadhyay, S. *Cryst. Gr. Des.* **2011**, *11*, 3250.
 Martins, M. A. P.; Meyer, A. R.; Tier, A.; Ducati, L. C.; Longhi, K.; Bonaccorso, H. G.; Zanatta, N.; Frizzo, C. P. *CrystEngComm*, **2015**, *17*, 7381.