

Introdução

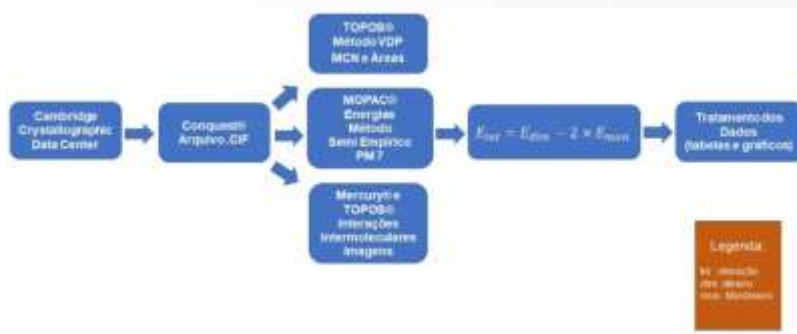
A formação do cristal é muito importante dentro da engenharia de cristais.¹ O processo de nucleação é o primeiro passo na formação de uma nova fase termodinâmica ou de uma nova estrutura via auto-montagem ou auto-organização.²

Objetivo

O objetivo da pesquisa foi o estudo supramolecular de 10 nitrilas aril halogenadas (F, Cl, Br, I).

Metodologia

A metodologia empregada no desenvolvimento da pesquisa segue a sequência de etapas do esquema abaixo utilizando os programas Conquest, TOPOS, MOPAC e Mercury:



Além disso as superfícies de contato entre as moléculas na primeira esfera de coordenação foram obtidos, a fim de auxiliar na proposta de um caminho para o processo de nucleação. Também 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 as interações, como se observa nas figuras a seguir.

Apresentação e Discussão dos Resultados

O MCN encontrado nos compostos foi igualmente distribuído, 5 compostos apresentaram MCN igual a 12 e os outros 5 MCN igual a 14 moléculas o que foi exemplificado na Figura 1 com o composto orto clorado. A energia total das interações intermoleculares no cluster varia de -49,3 a -135,32 kcal/mol.

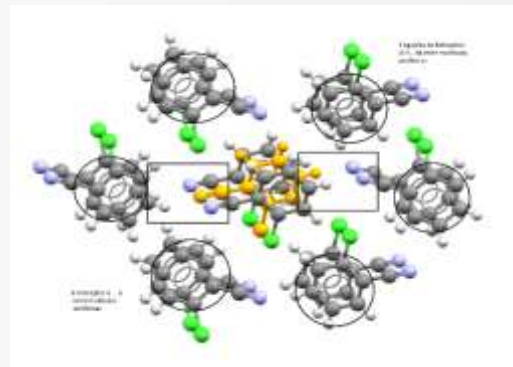


Figura 1

Considerando a ordem decrescente de energia das interações intermoleculares das benzonitrilas halogenadas nós propomos como ocorreria o processo de nucleação na formação do cristal. O composto *para*-cloro substituído foi usado como exemplo como exemplificado na Figura 2. O primeiro estágio ocorre com a formação da interação intermolecular $\pi \dots \pi$ com energia de estabilização de -8,82 kcal/mol. O segundo estágio deve ocorrer com a interação intermolecular na forma de dímero supramolecular através de ligação de hidrogênio C7-H7...N1 com energia de estabilização de -4,38 kcal/mol e C3-H3...Cl1 juntamente com C4-H4...N1 com energia de estabilização de -3,90 kcal/mol. O terceiro estágio deve ocorrer com a interação intermolecular N1...Cl1 via σ -hole com energia de estabilização de -1,44 kcal/mol.

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

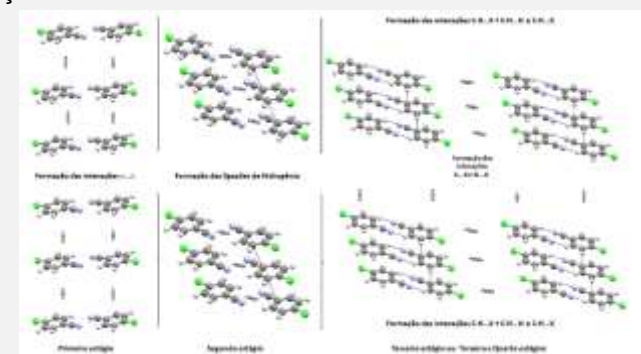


Figura 2

Conclusão

Nós verificamos quais interações intermoleculares governam o empacotamento cristalino nas estruturas supramoleculares em todas as benzonitrilas. 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.