

Caracterização estrutural de um novo composto supramolecular: bis[1-(diaminometileno)tiourôn-1-io] naftaleno-1,5-dissulfonato

MARCELA CAMPANHA FELIX (Autor), Genivaldo Júlio Perpétuo (Orientador), Jan Janczak (Co-Autor)

Instituição de Ensino - Universidade Federal de Ouro Preto

Palavras Chaves:

1-(diaminometileno)tiourea, química supramolecular, ligações de hidrogênio, difração de raios X

Resumo:

Interações intermoleculares são importantes no entendimento da auto-organização molecular de novos sólidos com propriedades físicas e químicas desejadas [1]. O estudo de sistemas formados por interações não covalentes promove uma interface entre diversas áreas do conhecimento pela infinidade de arranjos estruturais proporcionados por diferentes interações não covalentes entre as moléculas e íons constituintes, que em geral dispõem de diversos sítios de ligação. Neste trabalho o novo cristal de bis[1-(diaminometileno)tiourôn-1-io] naftaleno-1,5-dissulfonato, obtido pela técnica de crescimento em solução, foi caracterizado através da difração de raios X e das técnicas espectroscópicas FT-IR e Raman. Em estado cristalino, o arranjo dos componentes de cargas opostas é majoritariamente determinado por interações iônicas e ligações de hidrogênio. O composto cristaliza-se no grupo de espaço monoclinico centrossimétrico C2/c com quatro fórmulas por célula unitária. A análise estrutural foi realizada a temperatura ambiente e comparada com outros compostos de referência [2,3]. Cálculos semi-empíricos a partir da conformação experimental estão sendo realizados com a finalidade de quantificar a energia das interações intermoleculares. Agradecimentos: FAPEMIG, PROPP/UFOP Referências [1] Desiraju, G.R. Crystal Engineering: The Design of Organic Solids. Elsevier, Amsterdam (1989) [2] Perpétuo, G.J.; Gonçalves, R.S.; Janczak, J. J. Mol. Structure 1096, 74-83 (2015) [3] Perpétuo, G.J.; Janczak, J. Acta Cryst. C64, o21-o23 (2008)

Publicado em:

- Evento: Encontro de Saberes 2017
- Área: CIÊNCIAS EXATAS E DA TERRA
- Subárea: FÍSICA