

## Estrutura Supramolecular de Enaminonas no Estado Sólido

Marcos A. P. Martins,<sup>1</sup>(PQ)\* Clarissa P. Frizzo,<sup>1</sup>(PG) Mara R. B. Marzari,<sup>1</sup>(PG) Patrick T. Campos,<sup>1</sup>(PG), Lilian Buriol,<sup>1</sup>(PG), Enelise Scapin<sup>1</sup>(IC), Nilo Zanatta,<sup>1</sup>(PQ) Helio G. Bonacorso<sup>1</sup>(PQ)  
[mmartins@base.ufsm.br](mailto:mmartins@base.ufsm.br)

<sup>1</sup>Núcleo de Química de Heterociclos (NUQUIMHE), Departamento de Química, Universidade Federal de Santa Maria, 97105-900, Santa Maria, RS, Brasil.

Palavras Chave: enaminonas, supramolecular structure, AM1 calculations, crystal structure.

### Introdução

O entendimento da força e geometria das interações intermoleculares é necessário para o desenvolvimento de novos materiais supramoleculares. As interações C–H...O, embora sejam mais fracas que as ligações de hidrogênio convencionais, são certamente um dos fatores determinantes da estrutura de estruturas sólidas de proteínas<sup>1</sup>. Devido ao papel que estas interações exercem nos processos de reconhecimento molecular, é fundamental ter o conhecimento da energia envolvida nestas interações. Neste contexto, nosso objetivo aqui é descrever as interações intermoleculares de enaminonas e estimar a energia destas interações.

### Resultados e Discussão

Os dados cristalográficos e parâmetros estruturais dos compostos **1** e **2** (Figura 1), podem ser acessados no CCDC pelos números 649396 e 649394 respectivamente.

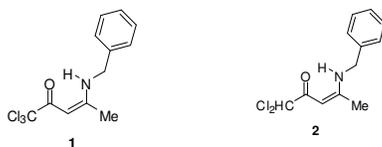


Figura 1. Enaminonas estudadas neste trabalho.

Na enaminona **1** ocorre uma interação entre o grupo C(O) e o hidrogênio da metila (C5) e metilênico (C6) com distâncias interatômicas de 3.274(5) Å para C5...O e 3.583(5) Å para C6...O (1-x, 1/2+y, 1.5-z) formando uma cadeia infinita ao longo de [100] (Figura 2). Na estrutura cristalina de **2**, as moléculas se organizaram em dímeros ao longo de [010] através de ligações de hidrogênio intermoleculares C(O) e o grupo NH com distância interatômica de 3.102(3) Å para N...O (-x+2, -y+1, -z) (Figura 2). Para o cálculo da estimativa da energia das interações, nós reproduzimos o arranjo cristalino utilizando cálculos AM1.

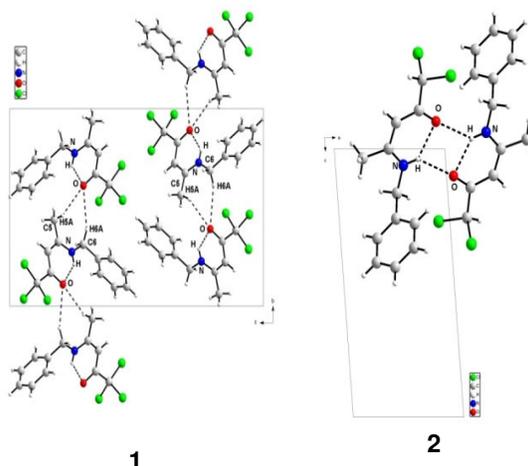


Figure 2. Interações intermoleculares dos compostos **1** [100] e **2** [010].

Iniciamos pela interação entre duas moléculas do composto **1**. A diferença de energia entre dímero e molécula isolada foi de  $-1.42 \text{ kcal}\cdot\text{mol}^{-1}$ . Para verificar a influência de outras interações na estabilização do cristal, fizemos a determinação da energia considerando interações entre três moléculas. Como esperado, a energia de estabilização foi maior ( $-2.55 \text{ kcal}\cdot\text{mol}^{-1}$ ). Os valores de energia encontrados utilizando de AM1 são próximos aqueles descritos na literatura para estas interações<sup>1</sup>.

### Conclusões

Através do estudo da estrutura supramolecular de enaminonas desenvolvemos um novo método para o cálculo da energia das interações intermoleculares em cristais.

### Agradecimentos

Os autores agradecem ao CNPq e CAPES e pelo apoio financeiro.

<sup>1</sup> Steiner, T *Angew. Chem. Intern. Ed.* **2002**, *41*, 48-76.