

P 038

Estudio de contactos no convencionales en cristales moleculares: análisis del aceptor π (fenilo) en presencia del grupo C–H

Fernando García Reyes^{1,2}, Gustavo A. Echeverría¹⁻³, Carlos G. Pozzi¹, Adolfo C. Fantoni¹, Graciela M. Punte^{1,2}

¹ IFLP (CCT-La Plata), Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas, UNLP. 115 y 49, (1900), La Plata, Argentina. ² LANADI, Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas, UNLP. 115 y 49, (1900), La Plata, Argentina. ³ Departamento de Ciencias Básicas, Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional de La Plata. CC67 115 y 49, (1900), La Plata Argentina. fgreyes@fisica.unlp.edu.ar

En los últimos años se ha reconocido la importancia que las interacciones no covalentes débiles desempeñan en la estabilidad de las estructuras cristalinas orgánicas [1]. En particular se sabe que el grupo carboximetilo puede interactuar con otro grupo carboximetilo por medio de contactos del tipo C–H(metilo)···O originando motivos estructurales característicos [2]. En estos sistemas se observa que el grupo C–H tiende a ubicarse en regiones cercanas a los pares solitarios del oxígeno donde la concentración de carga electrónica es mayor. De la misma manera cuando este grupo se encuentra en presencia de otros sistemas que presentan deslocalización de carga electrónica, tales como los anillos aromáticos constituidos por enlaces π (C–C), por ej. el fenilo, es esperable que se establezcan contactos del tipo C–H··· π (Ar). Estos contactos han sido estudiados por diferentes investigadores, quienes establecieron que el fenilo actúa como aceptor del átomo de H del C–H, en particular recientemente Mooibroek y Gamez [3] han estudiado la direccionalidad de los contactos D–H··· π (benceno) con diferentes donores D, teniendo en cuenta los resultados pre-existentes. Sin embargo con relación al fenilo existe aún cierta controversia en la forma de caracterizar la distribución de los contactos sobre la cara del fenilo teniendo en cuenta la posición del sustituyente. Por este motivo continuando con estudios previos sobre interacciones débiles, en este trabajo se propone el estudio de contactos C–H··· π (fenilo) utilizando técnicas estadísticas a partir de los datos cristalográficos disponibles en la Cambridge Structural Database (CSD) y cálculos *ab-initio*.

[1] Steiner, T., *Angew. Chem. Int.*, 41, 48-76 (2002). [2] García Reyes, F. et al., *Actas del I Taller y VIII Reunión Anual de la Asociación Argentina de Cristalografía*, Santa Fe, Argentina, 2012, (en prensa). [3] Mooibroek, T.J. y Gamez, P. *CrystEngCom* 14, 8462-8467 (2012) y referencias a partir de esta.
