



M. Fátima C. Guedes da Silva

“Interações fracas e seus marcantes efeitos em estruturas e reações químicas”

Resumo

Esta apresentação versará as interações não-covalentes entre átomos/moléculas, um assunto de interesse global uma vez que, apesar da sua fraca intensidade (bem inferior à das ligações covalentes convencionais), podem influenciar marcadamente o desenho, a construção, a síntese e a estabilidade das estruturas químicas, assim como as suas propriedades físico-químicas e aplicações. Sobre tais assuntos foram editados pelo nosso grupo os livros: “Non-covalent Interactions in the Synthesis and Design of New Compounds”, A.M. Maharramov, K.T. Mahmudov, M.N. Kopylovich, A.J.L. Pombeiro (eds.), J. Wiley & Sons, 2016; e “Non-covalent Interactions in Catalysis”, K.T. Mahmudov, M.N. Kopylovich, M.F.C. Guedes da Silva, A.J.L. Pombeiro (eds.), Royal Society of Chemistry, 2019.

Das interações que serão referidas salientam-se casos específicos das ligações de hidrogénio, designadamente as assistidas por ressonância e as assistidas por carga, e o modo como tais contactos podem ser ajustados pelo pH do meio e pela temperatura, influenciando a geração de blocos construtores em agregados supramoleculares, a resolução de isómeros, a reatividade, etc.

Além destas interações serão ainda discutidas as ligações de halogéneo (Ha) e as de calcogéneo (Ch), envolvendo respetivamente átomos dos grupo 17 e 16 da Tabela Periódica, bem menos conhecidas.

Estas interações (não-covalentes) baseiam-se na existência de regiões com potencial eletrostático positivo em posições opostas às das ligações covalentes envolvendo esses átomos. Tais interações permitem a criação de novos tipos de materiais com propriedades únicas e/ou com aplicações várias.

Abstract

This presentation will cover non-covalent interactions between atoms/molecules, a subject of global interest since, despite their low intensity (much lower than that of conventional covalent bonds) they can markedly influence the design, construction, synthesis, and stability of chemical structures, as well as their physico-chemical properties and applications. On such subjects our group edited the books: “Non-covalent Interactions in the Synthesis and Design of New Compounds”, A.M. Maharramov, K.T. Mahmudov, M.N. Kopylovich, A.J.L. Pombeiro (eds.), J. Wiley and Sons, 2016; and “Non-covalent Interactions in Catalysis”, K.T. Mahmudov, M.N. Kopylovich, M.F.C. Guedes da Silva, A.J.L. Pombeiro (eds.), Royal Society of Chemistry, 2019.

Specific cases of hydrogen bonds will be highlighted, namely those assisted by resonance and those assisted by charge, and how such contacts can be adjusted by the pH of the medium and temperature, influencing the generation of building blocks in supramolecular aggregates, the resolution of isomers, reactivity, etc..

In addition to these interactions, halogen (Ha) and chalcogen (Ch) bonds will also be discussed, involving atoms from groups 17 and 16, respectively, of the Periodic Table, which are much less known. These contacts are based on the existence of regions with positive electrostatic potential along covalent bonds involving these atoms. Such interactions allow the creation of new types of materials with unique properties and/or with various applications.

Academia das Ciências de Lisboa, 20 de abril de 2023