



Arreglo supramolecular del 1-(4-nitrofenil)-2-m-tolil-1H-benzo[d]imidazol

ITZIA IRENE PADILLA MARTINEZ¹, EFREN VENANCIO GARCIA BAEZ¹ y MINERVA JUAREZ JUAREZ¹

¹ Instituto Politécnico Nacional- UPIBI. ipadillamar@ipn.mx

El reconocimiento molecular es un concepto de la Química Supramolecular que corresponde a la capacidad que tienen las moléculas de reconocerse mutuamente y viene definido por la energía y la información involucradas en el enlace (no covalente) y selección del sustrato por una molécula receptora determinada. La interacción sustrato-receptor debe basarse en la afinidad entre ambos en cuanto a forma, tamaño, conformación, polaridad, polarizabilidad, fuerzas de van der Waals, etc. La afinidad entre dos moléculas en estas propiedades es una expresión de la complementariedad existente entre ellas. Esta afinidad o complementariedad expresa una información física y/o química a transmitirse entre las moléculas involucradas. A su vez, esta información molecular se revierte en el compuesto supramolecular formado.

En este trabajo de investigación se reporta el arreglos moleculares en la red cristalina de un nuevo derivado del bencimidazol 1.2-disustituido. El bencimidazol de interés cristaliza en un sistema triclinico, con grupo espacial P -1. La molécula se definió en una solo unidad asimétrica. Todas las distancias C-C, C-N, N-O están en perfecta concordancia con moléculas orgánicas del mismo tipo ya reportadas. Con respecto a las interacciones intermoleculares existente en la red cristalina, las interacciones C12-H12(anillo aromático del bencimidazol)...N3(anillo del imidazol) y la N13-O13A...Cg(1)(anillo del imidazol) las cuales se propagan en la dirección (0 8 -32).

Existen otras dos interacciones adicionales, una de las cuales es la C14-H14(anillo del nitrobencono)...Cg2(anillo aromático del bencimidazol) (-x,1-y,-z) con una distancia 2.76 Å. La otra interacción importante es la que involucra al grupo nitro N13-O13A...Cg3 3.254(2) Å, 1-x,1-y,-z. La molécula no es plana, el plano del grupo nitrobencono con respecto al plano del bencimidazol forman un ángulo de 65.3°, mientras que con el grupo tolil 28.5°.