



Estudio de las interacciones no covalentes en arreglos cristalinos por pares moleculares de diferentes conformaciones en bencimidazoles disustituídos

ITZIA IRENE PADILLA MARTINEZ¹, EFREN VENANCIO GARCIA BAEZ¹ y RAQUEL NAVA ALVAREZ¹

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

Se han reportado, que las magnitudes de las interacciones intermoleculares de moléculas se ven reflejadas en las propiedades fisicoquímicas, por ejemplo, solubilidad, puntos de fusión, densidad, etc. Nuestro interés es realizar el estudio cristalográfico del compuesto derivados de bencimidazoles, para nuestra molécula de interés, estudio revelan que cristalizan en un sistema triclinico, con grupo espacial P-1. Se encontraron 4 moléculas independientes en la unidad asimétrica llamadas 2A, 2B, 2C, 2D. En las 4 moléculas del compuesto, todas las distancias C-C de benceno caen en el promedio de 1.385, las distancias C-N caen el promedio N1-C2 1.393 Å, N1-C10 1.434Å, típicas para una hibridación sp^3 del N1 mientras que la distancias N3=C2 1.311Å para el nitrógeno N3 con hibridación sp^2 N3-C9 1.392 Å, N1-C8 1.395 Å. Por otro lado las cuatro moléculas presentan la misma magnitud de interacción anillo aromático posición 1 y anillo aromático posición 2 y anillo del bencimidazol 3 Existen diferencias significativas entre los planos 2 y 3 oscilan aproximadamente entre los 6 grados, mostrando la molécula **2C** el ángulo diedro entre el plano1 y el plano 3 es de 66.13° que es la mayor desviación de los planos de las cuatro moléculas (con respecto a la molécula **2A** que es de 59.28°). Con respecto a las interacciones intermoleculares de las cuatro moléculas independientes del compuesto en la red cristalina son del tipo $C_{arom}-H...O$, con los oxigenos de los grupo nitro, la distancia más corta es 2.33 Å entre la molécula **2C** y el grupo nitro de la molécula **2B**, otra interacción corta es de 2.34 Å entre la molécula **2D** con el grupo nitro de la molécula **2A**. Se observa una interacción adicional $C_{arom}-H...N$, el Nitrógeno 3 del anillo del bencimidazol. Se puede concluir que las cuatro moléculas, se relacionan entre pares de ellas por medio de interacciones CH...O, CH...N, además las 4 moléculas no son planas.