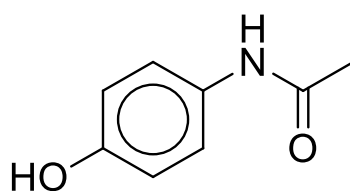


Introdução ao CCDC e ao Programa Mercury

Objetivo: Pesquisar as diferentes formas cristalinas (polimorfos e matérias multicompetentes) do paracetamol (I). Para o efeito será utilizada a base de dados da Cambridge Structural Database (CSD), do Cambridge Crystallographic Data Centre (CCDC), e utilizado o programa Mercury para a visualização de dados.



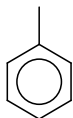
(I)

- 1) Descarregue e instale o programa Mercury a partir do link oficial, <https://bit.ly/3Ra5RkF> (o programa é gratuito, no entanto, o download pode requerer a criação de uma conta de utilizador) ou alternativo, <https://bit.ly/3Sbglkt>.
- 2) Aceda à base de dados CSD usando o link <https://www.ccdc.cam.ac.uk/structures/>. Realizar uma pesquisa usando o nome do composto (paracetamol). Grave a informação cristalográfica sobre os diferentes polimorfos e materiais multicomponentes conhecidos para este composto.
- 3) Identifique as estruturas cristalinas dos diferentes polimorfos do paracetamol usando o programa Mercury, em concreto retire a referência da estrutura, o grupo espacial, os parâmetros da célula unitária. Use, por exemplo, uma folha de Excel para coligir a informação recolhida.
- 4) Para os materiais multicomponentes identificados, verifique os coformadores e o tipo de interações intermoleculares que recorrentemente aparecem nestas estruturas. Com base nessa informação e na lista de compostos em baixo, identifique quais os coformadores que poderão potenciar a obtenção de materiais multicomponentes. Selecione dois dos coformadores identificados e calcule a massa de paracetamol e

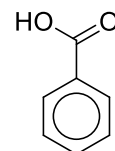
coformador, necessária para obter uma mistura com estequiometria 1:1 com uma massa total de 200 mg.



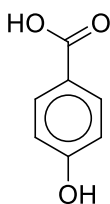
Benzeno



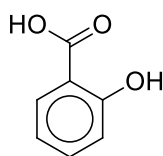
Tolueno



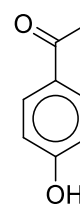
Ácido Benzoico



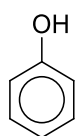
Ácido 4-hidroxibenzoico



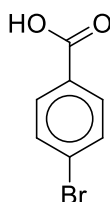
Ácido 2-hidroxibenzoico



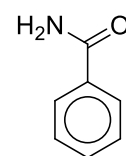
4'-hidroxiacetofenona



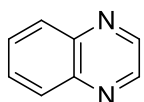
Fenol



Ácido 4-bromobenzoico



Benzamida



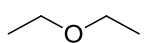
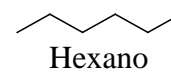
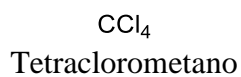
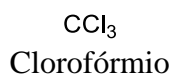
Quinoxalina



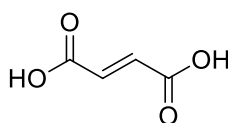
Ciclopentadieno



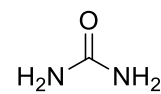
Tetrahidropirano (oxano)



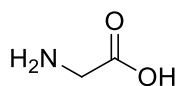
Éter dietílico



Ácido Fumárico



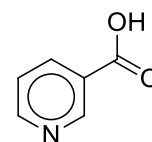
Ureia



Glicina



Acetona



Ácido Nicotínico