

Universidade de Lisboa
Faculdade de Ciências
Departamento de Química e Bioquímica



**Materials orgânicos cristalinos feitos à medida: os passos
iniciais da sua formação a partir de solução**

Catarina Seixas Caldeira

nº 51364

Projeto Tecnológico

Licenciatura em Química Tecnológica

Projeto orientado pela Professora Doutora Maria da Soledade Santos e
pelo Professor Doutor Manuel Minas da Piedade

2019/2020

Agradecimentos

Em primeiro lugar, gostaria de agradecer aos Professores orientadores deste projeto, com especial atenção à Professora Doutora Maria da Soledade Santos, pelo apoio incondicional, *feedback* construtivo e disponibilidade, que me ajudaram a elevar continuamente a qualidade do meu trabalho.

O meu agradecimento estende-se aos colegas de laboratório pelo incentivo, ensinamentos, e boa disposição em todos os momentos.

Aos meus amigos que continuam a crescer comigo e colegas de faculdade que tornaram estes anos ainda mais especiais, agradeço todas as palavras de incentivo, carinho e amizade e por me motivarem constantemente para alcançar os meus objetivos.

Por fim, mas não menos importante, quero agradecer aos meus pais, irmãos e avós, por toda a força, carinho, motivação e coragem que sempre me prestaram, por acreditarem no meu potencial e confiarem em mim, e por celebrarem comigo todas as minhas vitórias. A eles dedico este trabalho.

Resumo

Atualmente o desconhecimento sobre os passos iniciais da cristalização a partir de uma solução constitui uma das maiores limitações ao desenvolvimento de métodos industriais para a produção de certos produtos orgânicos com interesse para a indústria farmacêutica. O avanço no conhecimento sobre as fases iniciais da cristalização, em particular os fenômenos que determinam a formação de agregados moleculares em solução, requer um conjunto de metodologias experimentais e teóricas que ajudam a perceber várias questões quanto à seletividade da produção de certos compostos.

Neste projeto, foram estudados os processos de agregação em soluções de compostos do tipo 4-HOC₆H₄COR, (R = H, Me, Et, Pr e But) em acetato de etilo, de modo a analisar como a natureza do solvente e as variações sistemáticas da estrutura molecular podem afetar o tipo de agregados formados em solução.

Os estudos envolvem medidas de densidade, e de tensão superficial de soluções previamente preparadas de composição variável, a 298,15 K, de modo a identificar a tendência para formação de agregados em solução e eventuais alterações na esfera de solvatação.

Palavras chave: Agregação, densidades, tensão superficial, interações moleculares, volumes molares aparentes.

Abstract

Currently, the lack of knowledge about the initial stages of crystallization from a solution is considered one of the greatest threats to the development of industrial methods for the production of certain organic products with interest to the pharmaceutical industry. The advance in knowledge about the initial phases of crystallization, in particular the phenomena that determine the formation of molecular aggregates in solution, requires a set of experimental and theoretical methods that help to understand several issues regarding the selectivity of the production of certain compounds.

In this project, the aggregation processes in solutions of compounds of type 4-HOC₆H₄COR, (R = H, Me, Et, Pr and But) in ethyl acetate were studied, in order to analyze how the nature of the solvent and the systematic variations of the molecular structure can affect the type of aggregates formed in solution.

The studies involved density and surface tension measurements, of previously prepared solutions with variable composition, at 298,15 K, in order to identify the tendency for formation of aggregates and possible changes in the solvation sphere.

Keywords: Aggregation, densities, surface tension, molecular interactions, apparent molar volumes.