

# Introducción a la Búsqueda en Base de Datos Estructural (CSD) Parte A: Introducción a Mercury

## ANTES DE COMENZAR

- Los archivos de las estructuras cristalinas vinculadas a los ejercicios se encuentran en las carpeta de dropbox:

\Guías TP y Problemas\ Introduccion a la Base de Datos Estructural - Parte A

<https://www.dropbox.com/scl/fo/1bn6z5sphaia2u6x4arvt/h?rlkey=e835knkrbqlyeet3wcxhchrhv&dl=0>

- Para descargar el programa Mercury para realizar los ejercicios:

<https://www.ccdc.cam.ac.uk/solutions/software/free-mercury/>

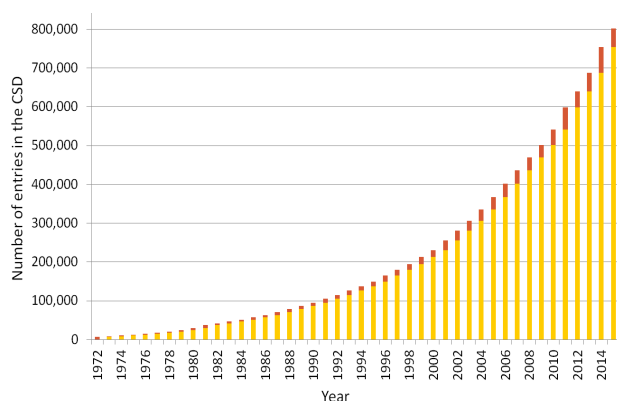
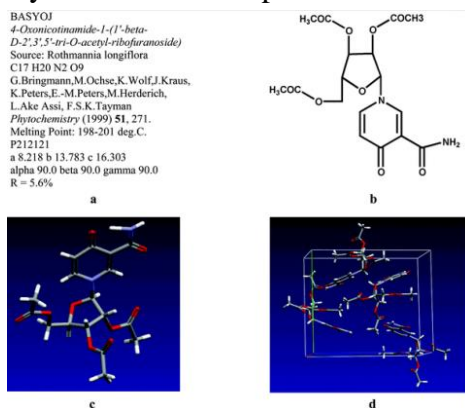
Ver instrucciones detalladas en el ANEXO.

## Introducción

El análisis estructural se ha convertido en una de las técnicas más precisas para recoger información sobre estructuras de interés científico gracias a disponer actualmente de difractómetros automáticos y computadoras de gran poder de cálculo. Asimismo la cantidad de información recopilada es tan grande que es necesario disponer de bancos de datos que permitan el uso rápido, fácil y eficaz de las coordenadas atómicas. Estas son las razones del porque han sido desarrollados los bancos de datos cristalográficos, los cuales, además, están recibiendo un interés creciente por parte de cristalógrafos. De entre ellos, los más importantes desde el punto de vista estructural son los siguientes:

## Cambridge Structural Data Base (CSD)

La base de datos de Cambridge contiene los datos estructurales cristalográficos derivados de estudios de difracción de rayos X o neutrones en compuestos orgánicos, organometalicos y complejos metálicos. Esta base de datos excluye proteínas, polímeros de alto peso molecular y sales puramente inorgánicas. Cada una de las entradas se identifica con un código de referencia de 8 caracteres (REFCODE) y contiene información bibliográfica que especifica la referencia de la revista, autores y nombre del compuesto.



ConQuest es el programa principal para buscar información en esta base de datos, y proporciona una amplia gama de opciones para búsquedas flexibles lo que permite analizar el contenido de más de 800 mil estructuras cristalinas. Éstas incluyen:

- Opciones de búsqueda a través de texto y datos numéricos que permite localizar estructuras basadas en nombre del compuesto, fórmula, composición elemental, referencia de la literatura y detalles experimentales.
- Búsqueda de subestructura química, incluyendo la capacidad de definir restricciones químicas tales como carga, estado de la hibridación o aromaticidad.
- Búsqueda de geometría 3D que permite analizar rápidamente las dimensiones moleculares y determinar las preferencias conformacionales.
- Búsqueda de contactos intermoleculares e interacciones débiles lo que permite explorar las interacciones de todo tipo, localizando patrones farmacofóricos.

## Objetivos.

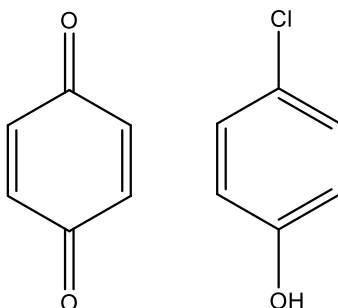
Aprender a utilizar los programas Mercury (v. 2023.2.0) y ConQuest (v. 1.21) mediante la realización de búsquedas en la base de datos cristalográfica de Cambridge (CSD), análisis estructural y estadístico de los resultados obtenidos.

## Desarrollo experimental.

### 1. Mercury

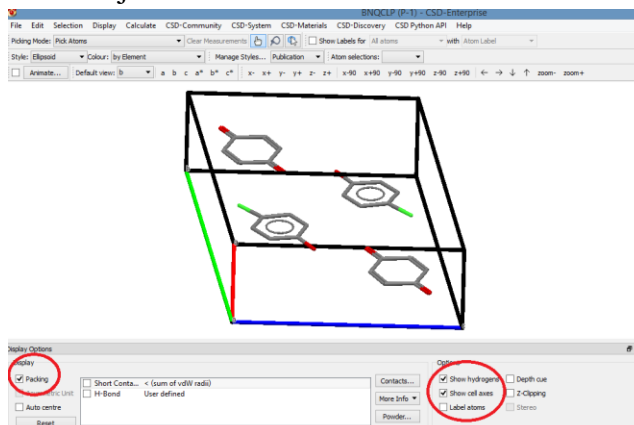
#### 1.1 Explorando Interacciones Débiles

Se buscaran interacciones intermoleculares en el co-cristal de *p*-benzoquinona y *p*-clorofenol.

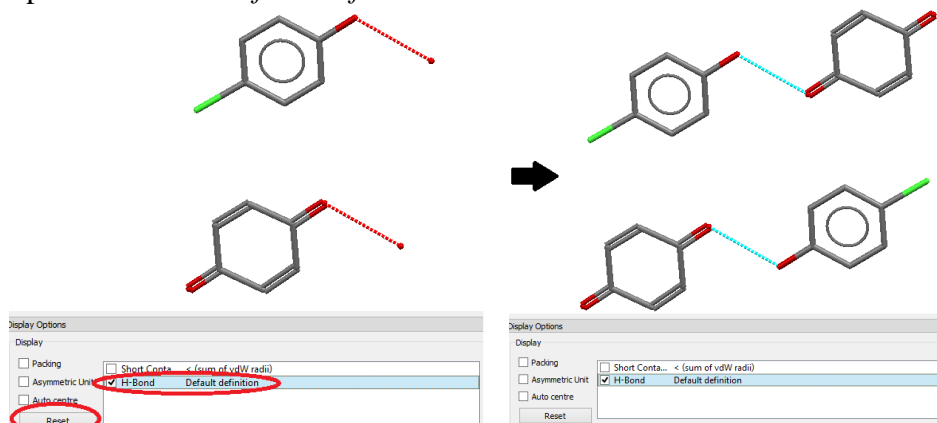


1.1.1 Abra la estructura BNQCLP.cif

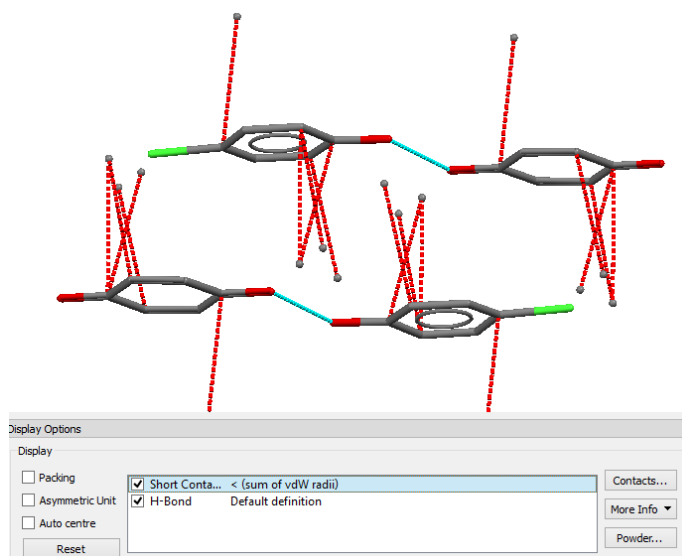
1.1.2 Realice un primer análisis a la estructura, para eso habilite la opción **Packing** en el menú de abajo a la izquierda. Los átomos de hidrogeno no han sido localizados por los cristalografos por lo tanto no son mostrados, aun cuando se habilite la opción **Show hydrogen** en el menú de abajo a la derecha.



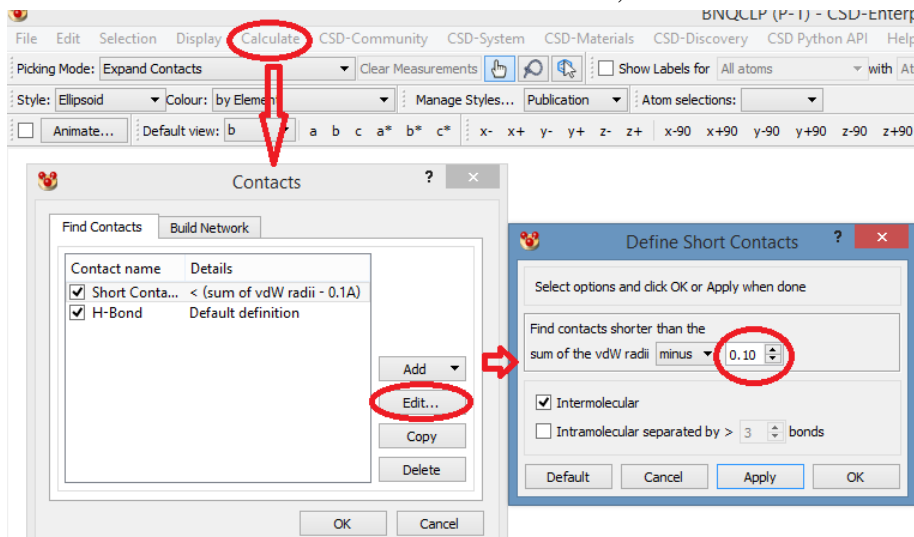
- 1.1.3 Use el mouse para analizar las moléculas y tener una primera impresión de la estructura. Para rotarlas, oprima el botón izquierdo y mueva el cursor del mouse. Para rotar en el plano de la pantalla, presione la tecla Shift y mueva el cursor del mouse. Si quiere hacer zoom sobre la estructura, oprima el botón derecho y mueva el cursor del mouse. Para trasladar la estructura, presione la tecla Ctrl y mueva el cursor del mouse.
- 1.1.4 Presione el botón Reset, abajo a la izquierda, para volver a la posición original en donde solo la celda asimétrica es mostrada.
- 1.1.5 Tilde la opción **H-bond Default definition**



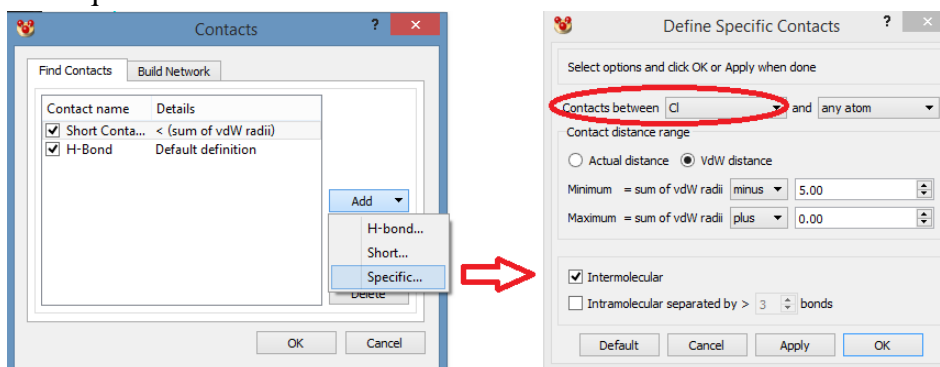
- 1.1.6 Se muestran en líneas punteadas rojas los puentes de hidrogeno formado por las dos moléculas. Ambas interacciones son cristalográficamente equivalentes.
- 1.1.7 Presione sobre ambos puntos rojos al final de cada línea punteada. Aparecerán las moléculas que forman la interacción, y los puentes de hidrogeno ahora se muestran en celeste, ya que estos fueron "expandidos" (*expanded*).
- 1.1.8 Como las coordenadas de los átomos de hidrogeno no están disponibles para esta estructura, debemos inferir que el puente de hidrogeno involucra al OH del clorofenol, el cual dona su H al oxigeno carboxílico de la benzoquinona. Esto tiene sentido: el único dador de puente de hidrogeno en la estructura esta unido al mayor grupo aceptor.
- 1.1.9 Se pueden encontrar otras interacciones no covalentes, y evaluar su magnitud. Para ello seleccione la opción **Short Contact**  $< (sum\ of\ vdW\ radii)$ , lo cual mostrará todos los contactos menores a la suma de los radios de van del Walls.
- 1.1.10 Como se puede ver, hay muchos contactos por encima y por debajo de los planos de los anillos aromáticos.



- 1.1.11 Para estimar que tan cortos son estos contactos, podemos medirlos individualmente. Sin embargo, hay una manera más fácil. Seleccione **Calculate** en el menú superior, y luego **Contacts**. Se abrirá un cuadro de dialogo, el cual permite modificar los criterios utilizados en Mercury. Seleccione **Short Contact** < (*sum of vdW radii*), y luego **Edit**. Se abrirá un segundo cuadro de dialogo, en el cual debe cambiar los parámetros de **Find contacts shorter than the sum of the vdW radii minus**, a 0.1.



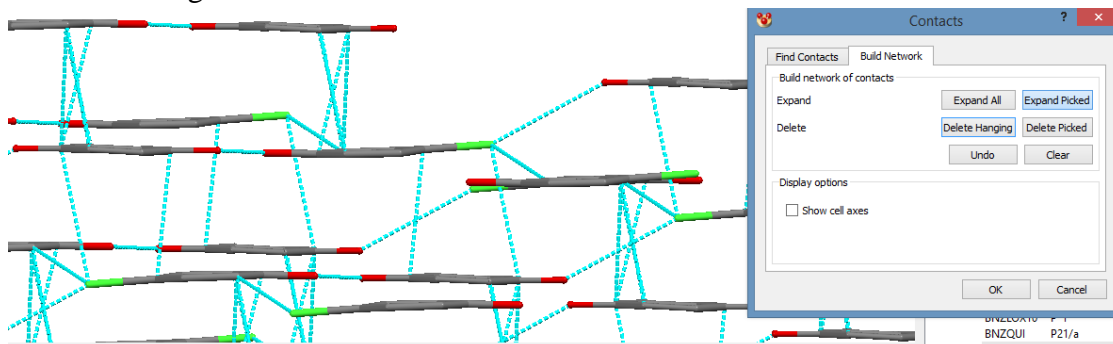
- 1.1.12 Al tocar **Apply**, todos los contactos (excepto los puentes de hidrogeno) desaparecen de la pantalla, indicando que ninguno de ellos es inusualmente corto: ellos son más cortos que la suma de radios de vdW pero más largos que (la suma de vdW – 0.1) Å.
- 1.1.13 Es posible mover ambos cuadros de dialogo para obtener una mejor visualización de la molécula y sus interacciones al modificar estos parámetros.
- 1.1.14 Vuelva a dejar el valor anterior en 0 Å y luego en la solapa **Build Network**, seleccione **Expand All**. De esta forma se tiene una imagen global del packing del sistema: Pares de moléculas unidas por puente de hidrogeno, apiladas de forma escalonada.
- 1.1.15 También se puede analizar el entorno de un átomo en particular, por ejemplo el átomo de cloro. Desde el menú **Contacts**, presionar el botón **Add** y luego **Specific**. Esto abrirá el menú *Define Specific Contacts*, el cual le permitirá definir cualquier tipo de contacto para realizar la búsqueda.



- 1.1.16 Se puede seleccionar el átomo sobre el cual se quiere hacer la búsqueda, en este caso Cl. También se puede especificar con que otros átomos interactúa, cualquiera, en este caso.
- 1.1.17 Modifique el parámetro *Maximum = sum of vdW radii plus 0.0* a *Maximum = sum of vdW radii plus 0.1*, y luego toque **Apply**. Esto mostrará cualquier interacción intermolecular Cl --- X menor a la suma de radios de van der Waals más 0.1 Å. No hay ninguna interacción con esta restricción.

1.1.18 Ahora, modifique el valor por 0.2 y nuevamente presione **Apply**. Ahora si se observan contactos que involucran a los átomos de cloro.

1.1.19 Toque OK para cerrar la el cuadro de dialogo. Luego presione la solapa **Build Network**, luego **Expand All** y por ultimo **Delete Hanging**. Esta última opción, elimina los contactos que no forman parte de una interacción. Finalmente presione OK para cerrar el cuadro de dialogo **Contacts**.



1.1.20 Se pueden listar todas las interacciones presentes en la pantalla. Para eso en el menú de abajo al centro, presione el botón **More Info**, y luego **Contacts List**.

1.1.21 Encuentre la interacción C1 --- O y confirme que la distancia es 3.379 Å.

Current structure: BNQCLP

Right-click on a contact for options. Click on a column heading to sort rows.

Save...

Number	Atom1	Atom2	Symm. op. 1	Symm. op. 2	Length	Length-VdW	Expanded	Xorth1	Yorth1	Zorth1	Xorth2	Yorth2	Zorth2
1	O1	O3	x,y,z	-x,-y,1-z	2.702	-0.338	Yes	-4.3819	1.1889	4.7783	-3.8934	-0.0015	7.1547
2	C6	C10	x,y,z	-1+x,y,z	3.385	-0.015	Yes	-3.5493	1.9963	2.7223	-3.1584	-1.2973	2.0455
3	C6	C11	x,y,z	-1+x,y,z	3.309	-0.091	Yes	-3.5493	1.9963	2.7223	-4.5156	-0.9679	1.6140
4	C7	C10	x,y,z	-1+x,y,z	3.359	-0.041	Yes	-3.2919	1.4443	3.9811	-3.1584	-1.2973	2.0455
5	C8	C4	x,y,z	-1+x,y,z	3.308	-0.092	Yes	-2.0272	1.1375	4.3409	-2.9726	-1.8929	3.4119
6	C1	C2	x,y,z	-1+x,1+y,z	3.362	-0.038	Yes	-1.2421	1.8541	2.2260	-1.2138	4.8705	3.7092
7	C6	C11	x,y,z	-1+x,y,z	3.582	0.132	Yes	-3.5493	1.9963	2.7223	-6.7230	2.0645	1.0621
8	C11	C10	x,y,z	-1+x,1+y,z	3.607	0.157	Yes	0.0770	2.0645	1.0621	1.0280	5.4023	2.0455
9	C11	O2	x,y,z	1-x,-y,-z	3.379	0.109	Yes	0.0770	2.0645	1.0621	2.2229	1.1152	-1.3687

Close

1.1.22 Finalmente, si usted quiere guardar el análisis realizado, en el menú superior **File** seleccione la opción **Save As**. Elija la opción **.mrxs**, la cual retendrá todo lo hecho en pantalla.

Current structure: tutorial6

Click to select an atom; Click and drag to select multiple atoms. Right-click on an atom for options. Click on a column heading to sort rows.

Save... Select All Deselect All

Number	Label	Charge	SybylType	Symm. op.	U11	U22	U33	U12	U13	U23	Uequiv	ADP type
1	1 Pt2	0 Pt	x,y,z		0.0168	0.0113	0.0153	-0.0005	-0.0014	0.0006	0.0145	Anisotropic
2	2 P1	0 P,3	x,y,z		0.0206	0.0113	0.0222	-0.0042	0.0023	0.0015	0.0180	Anisotropic
3	3 P2	0 P,3	x,y,z		0.0235	0.0172	0.0204	-0.0016	-0.0081	0.0004	0.0204	Anisotropic
4	4 C1	0 C,3	x,y,z		0.0160	0.0100	0.0250	-0.0010	-0.0010	-0.0010	0.0170	Anisotropic
5	5 B3	0 B	x,y,z		0.0220	0.0130	0.0130	-0.0050	-0.0100	-0.0010	0.0160	Anisotropic
6	6 H3	0 H	x,y,z								0.0190	Isotropic
7	7 B4	0 B	x,y,z		0.0230	0.0280	0.0130	-0.0040	0.0010	0.0010	0.0213	Anisotropic
8	8 H4	0 H	x,y,z								0.0260	Isotropic
9	9 B5	0 B	x,y,z		0.0150	0.0150	0.0330	-0.0090	0.0060	0.0060	0.0210	Anisotropic
10	10 H5	0 H	x,y,z								0.0250	Isotropic
11	11 B6	0 B	x,y,z		0.0250	0.0050	0.0150	0.0020	0.0010	0.0040	0.0150	Anisotropic
12	12 H6	0 H	x,y,z								0.0180	Isotropic
13	13 B7	0 B	x,y,z		0.0250	0.0130	0.0110	0.0020	-0.0040	-0.0030	0.0163	Anisotropic
14	14 H7	0 H	x,y,z								0.0200	Isotropic

Close

Las actividades que siguen requieren de la **versión con licencia** de los programas, con la cual contamos en el DQIAyQF/INQUIMAE. Consultar con los docentes la posibilidad de uso de la misma.

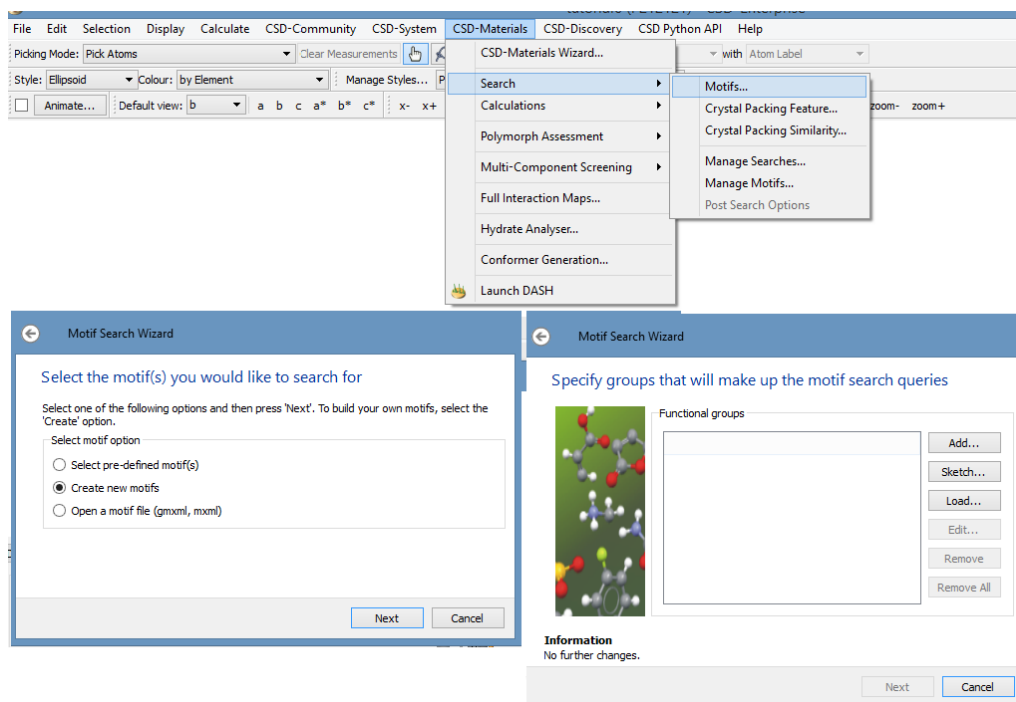
## 1.2 Buscando Puentes de Hidrogeno

Conseguir el control de cómo las moléculas interactúan en el estado sólido es, por muchas razones, una meta muy deseable. Los "motivos" de enlaces de hidrógeno se utilizan comúnmente como una forma de direccionar las interacciones entre moléculas. Es importante entender cuál es el resultado probable de las interacciones de grupos funcionales entre moléculas, por lo que vamos a ver las interacciones que suceden en el motivo carbamilo (R2NC(O)) para aprender cómo estos grupos se agrupan.

Comenzar la búsqueda de motivos

1.2.1 Haga clic en CSD-Materials en el menú superior, luego **Search** y seleccione **Motifs**.

1.2.2 Vamos a generar nuestros propios motivos, en lugar de utilizar los motivos predefinidos disponibles en las listas expandibles. Seleccione el botón de opción **Create new motifs** y haga clic en **Next** para iniciar el asistente de búsqueda de motivos.

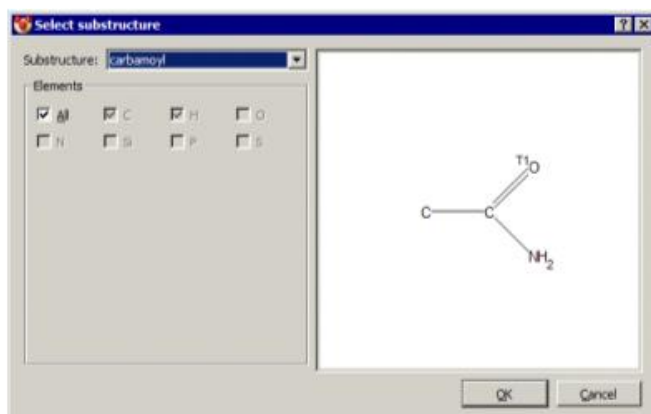


1.2.3 Hay tres pasos básicos en el proceso de generación de motivos: Definición de grupos funcionales, Selección de contactos y Generación de consultas de búsqueda de motivos. Vamos a realizar los tres.

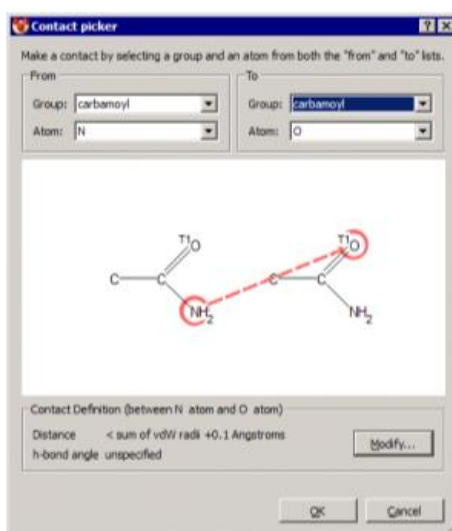
1.2.4 Aquí puede definir grupos funcionales que se incluirán en las consultas de búsqueda de motivos. También se puede:

- Añadir grupos predefinidos de una lista de conjuntos mediante el botón **Add...**
- Dibujar los grupos deseados usando el botón **Sketch...**
- Cargar grupos de archivos .con (connser) guardados mediante el botón **Load...**

- 1.2.5 El grupo carbamilo es un grupo funcional predefinido así que haga clic en **Add...** para elegir el grupo. Seleccione el grupo **carbamoyl** de la lista desplegable en el diálogo **Select substructure**.



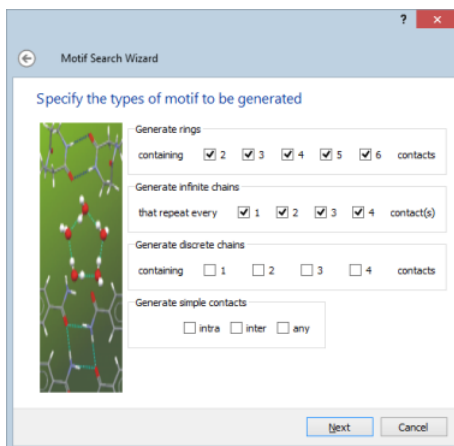
- 1.2.6 Haga clic en **OK** y, a continuación, haga clic en **Next** para continuar.
- 1.2.7 A continuación tenemos que definir los contactos entre los grupos funcionales que se utilizarán para generar los motivos. Haga clic en el botón **Add...** En la solapa resultante, establezca un contacto entre el N y el O del carbamoilo seleccionando los grupos carbamilo de las listas desplegables *from* y *to*.



- 1.2.8 Los átomos que intervienen en el contacto se pueden elegir haciendo clic en los átomos en la ventana de visualización, pero dado que en este caso, los átomos elegidos por defecto son correctos, haga clic en **OK** para continuar y luego **Next**.
- Nota: En este ejemplo no tenemos la opción de seleccionar un contacto que involucre átomos de hidrógeno. Esto es simplemente porque los hidrógenos no fueron dibujados explícitamente cuando se definió el grupo carbamilo, en su lugar los hidrógenos se ven como una restricción sobre el átomo de nitrógeno.



- 1.2.9 Estamos interesados en buscar motivos que implican anillos y cadenas infinitas. Haga clic en las casillas de verificación para los motivos de anillo que contienen 2, 3, 4, 5 y 6 contactos. También haga clic en las casillas de verificación de cadenas infinitas que se repiten cada 1, 2, 3 y 4 contactos.



- 1.2.10 Haga clic en **Next** para iniciar el algoritmo que toma los contactos y las geometrías de motivos solicitados y genera todas las posibles combinaciones de contactos que coinciden con los criterios. Por ejemplo, comprobar las casillas como se ha descrito anteriormente generará 33 motivos únicos. Cuando los motivos se han generado, haga clic en **Next**.

- 1.2.11 Ahora debemos elegir las estructuras que se buscarán utilizando en esta consulta de Motivos. Deseamos buscar en toda la base de datos estructural de Cambridge, por lo que en la lista de bases de datos expandibles, haga clic en la última versión de la CSD disponible. Una vez seleccionada esta opción, se activará un botón con una flecha de hacia la derecha de color azul.

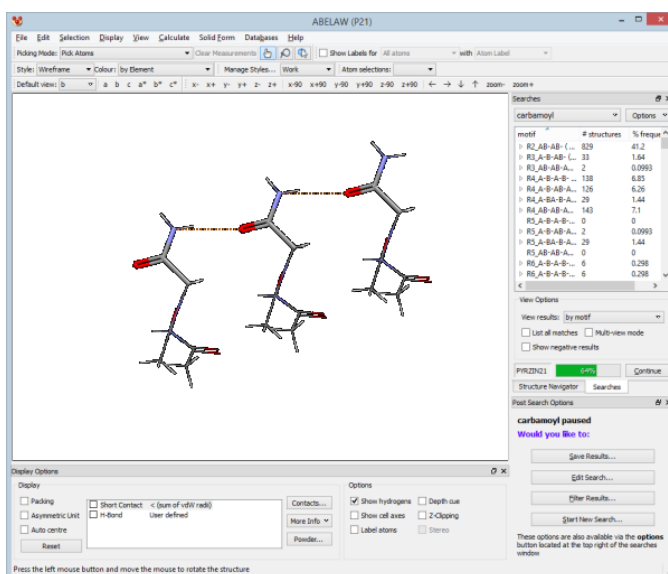


- 1.2.12 Haga clic en este botón para mover la base de datos seleccionada a la derecha y a continuación haga clic en **Next**.

- 1.2.13 Por último, introduzca un nombre para la búsqueda, por ejemplo "carbamoil" y comience la búsqueda haciendo clic en **Start Search**.

Visualización y análisis de los resultados.

- 1.2.14 Puede permitir que la búsqueda se ejecute en toda la base de datos (lo que puede tardar un tiempo) o puede detener la búsqueda antes pulsando el botón **Pause** en la parte inferior de la pestaña Search. Hay dos maneras de ver los resultados de una búsqueda. En primer lugar, vamos a utilizar el modo *View results by motif*. Asegúrese que **by motif** esta seleccionado en la lista desplegable **View results** en la parte inferior del Navegador de Estructuras.

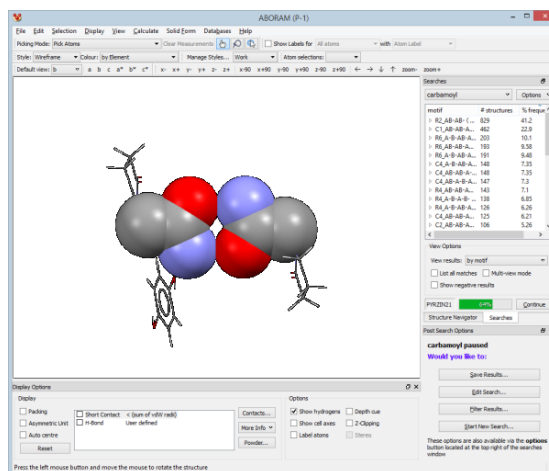


Vista por modo de motivo enumera los motivos buscados, con el refcode correspondiente.

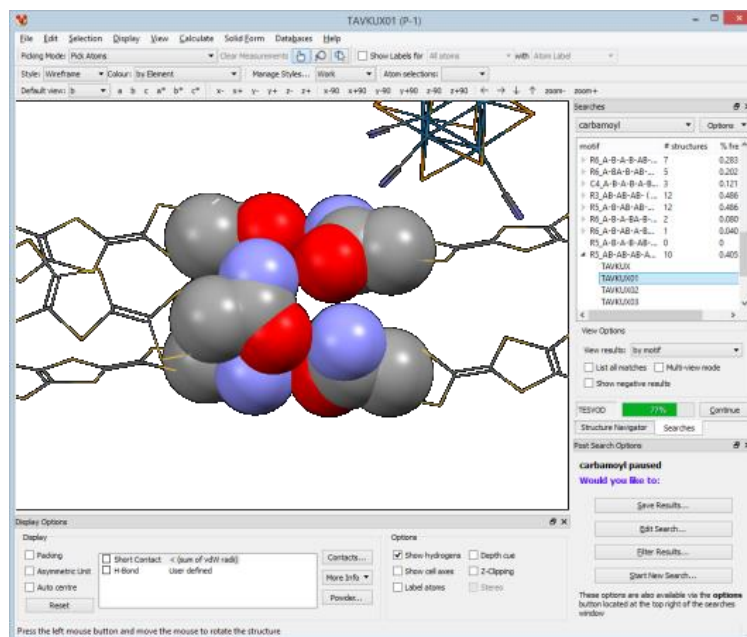


1.2.15 Se muestra en la pantalla la estructura seleccionada, con el fragmento del motivo de la molécula resaltada. El resaltado del motivo se puede personalizar haciendo clic en el botón **Options** situado en la parte superior del Navegador de Estructura y seleccionando **highlighting**. Resalte el motivo utilizando la opción **spacefill**.

1.2.16 Para ver qué motivos se forman con mayor frecuencia, haga clic en el encabezado de la columna **%frequency** en el Navegador de Estructura. Esto ordenará los motivos en orden ascendente de frecuencia de ocurrencia así que los motivos más comunes están al final de la lista. Vemos que el motivo más común es el motivo de dímero R2, seguido de cerca por el motivo cadena C1 infinito. Ambos motivos tienen una propensión razonablemente alta a formarse, lo que indica que estos motivos son herramientas potencialmente útiles para la ingeniería de estructuras cristalinas.

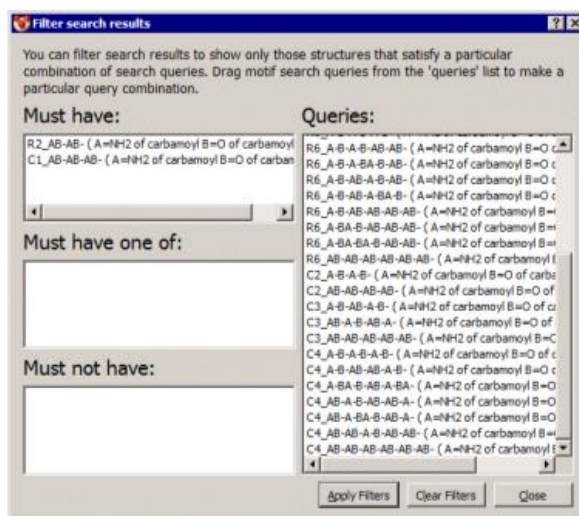


1.2.17 Algunos de los motivos menos comunes en este caso son los anillos con 5 contactos. Explore un poco más los patrones que ocurren en estas estructuras haciendo clic en los nombres de refcode que aparecen debajo de los motivos R5. Un ejemplo de una estructura con el motivo R5 es TAVKUX01 - en este caso un motivo R5 se consigue a través de más de una molécula en la unidad asimétrica.



1.2.18 Para encontrar las estructuras que contienen tanto el motivo de dímero R2 como el motivo de cadena C1 podemos filtrar los resultados de búsqueda. Haga clic en el botón **Options** en la parte superior del Navegador de Estructura y seleccione **Filter Results**.

1.2.19 Arrastre y suelte el motivo de dímero R2 y el motivo de cadena infinita C1 al cuadro **Must have**. Pulse **Apply Filters** y luego **Close**. Los resultados del filtrado se presentan en una segunda solapa.



1.2.20 En el modo *View by Structure* se enumeran los refcodes y los motivos encontrados dentro de cada estructura. Haga clic en la columna **number of motifs** para ordenar la lista en orden ascendente. Refcodes que contienen dos motivos sólo contendrán el motivo R2 y el motivo de cadena infinita C1. Haga clic en **Multi-view mode** en la parte inferior del panel. Esto permitirá que los motivos dentro de una estructura sean vistos simultáneamente. Busque una estructura que contenga 2 motivos y expanda la lista para verlos. Haga clic en cada motivo y podrá ver cómo encajan los mismos en la estructura cristalina.

Structure	number of motifs	% frequenc
ACEMID	8	
ACEMID06	8	
ADIPAM11	11	
ARCLAM	9	
ARCLAM01	9	
AZLMID01	8	
AZLMID02	8	
AZLMID10	8	
BARFEF	9	
BBEZAM	8	
BBEZAM01	8	
BDFACM	9	
BENAFM10	8	
BENAFP	9	
BENAFP01	9	
BIGSUF	11	
BOZKOO	9	
BRBZAO	8	
BZAMID	8	
BZAMID01	8	
BZAMID02	8	
BZAMID03	8	
BZAMID04	8	

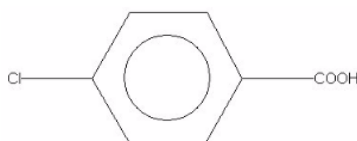
1.2.21 Si observa los refcodes que contienen más de 2 motivos, notará que el motivo R6 (AB-AB-AB-AB-AB) es muy común entre las estructuras que contienen tanto el motivo R2 como el motivo de cadena infinita C1.

1.2.22 Si filtramos los resultados de la búsqueda para eliminar todas las estructuras que contienen el motivo de dímero R2 y el motivo de cadena infinita C1, nos quedamos con un pequeño porcentaje de estructuras. Mirando a través de estas estructuras es interesante observar que el motivo C2 (AB-AB-AB-AB) es bastante frecuente.

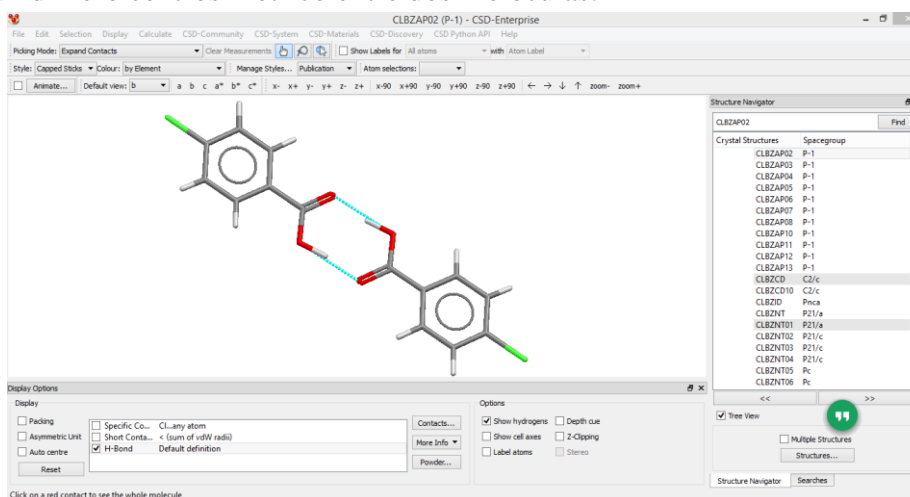
### 1.3 Estudiando Características del Empaquetamiento (*packing*) Cristalino

En esta parte se encontrarán y compararán estructuras en la CSD con contactos de *packing* que son similares a una interacción específica.

1.3.1 Cargue la primera estructura escribiendo CLBZAP02 en el cuadro de entrada en la parte superior del panel Structures dentro del *Structure Navigator*, o ábralo del archivo \*.cif correspondiente. Esto mostrará la estructura del ácido 4-clorobenzoico.

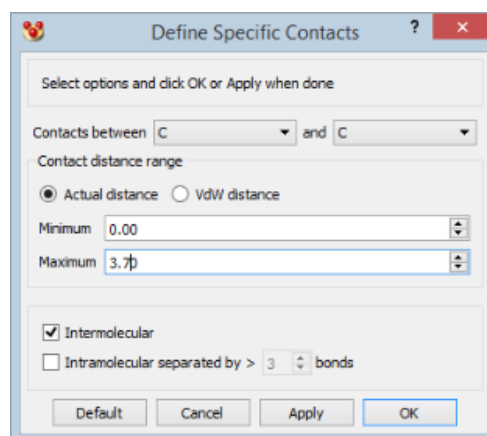


1.3.2 Seleccione **H-Bond** en el cuadro debajo del área de visualización. Esto mostrará las interacciones de enlace de hidrógeno formadas por el grupo de ácido carboxílico de la molécula. Haciendo clic con el botón izquierdo del *mouse* en una de las líneas rojas se mostrará la molécula en el otro extremo del enlace de hidrógeno - estas interacciones forman un dímero centrosimétrico entre dos moléculas.

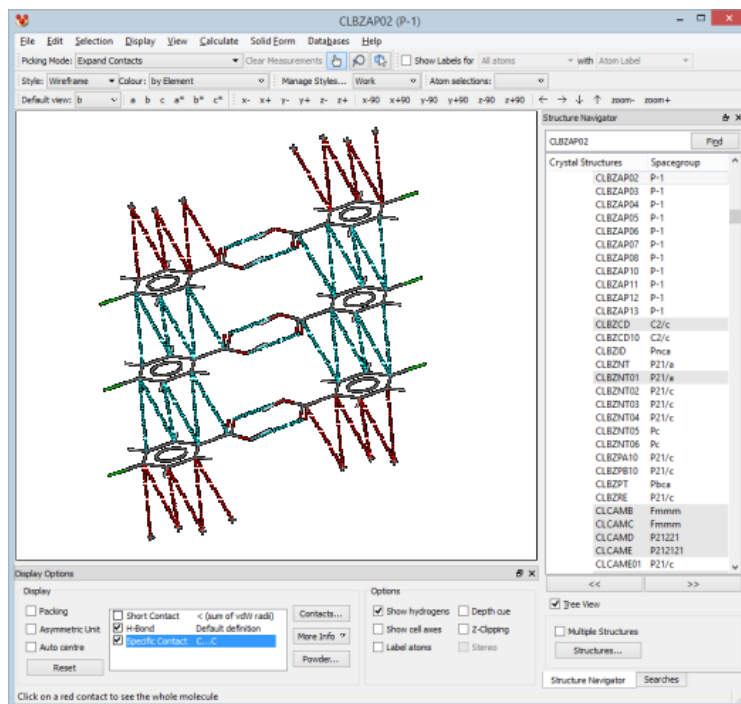


1.3.3 Para los propósitos de este ejemplo estamos interesados en evaluar el *stacking* entre grupos fenilos, por lo que, para mostrar estas interacciones, necesitamos generar un nuevo contacto específico.

1.3.4 Para generar un contacto específico para las interacciones de *stacking*, haga clic en el botón **Contacts** en el cuadro debajo del área de visualización. En la solapa **Find Contacts** haga clic en el botón **Add** y elija **Specific** en el menú desplegable, esto mostrará el diálogo **Define Specific Contacts**. Seleccione esta opción para mostrar los contactos entre átomos C y C con un rango de distancia especificado por **Actual distance** de 0,0 a 3,7 Å.

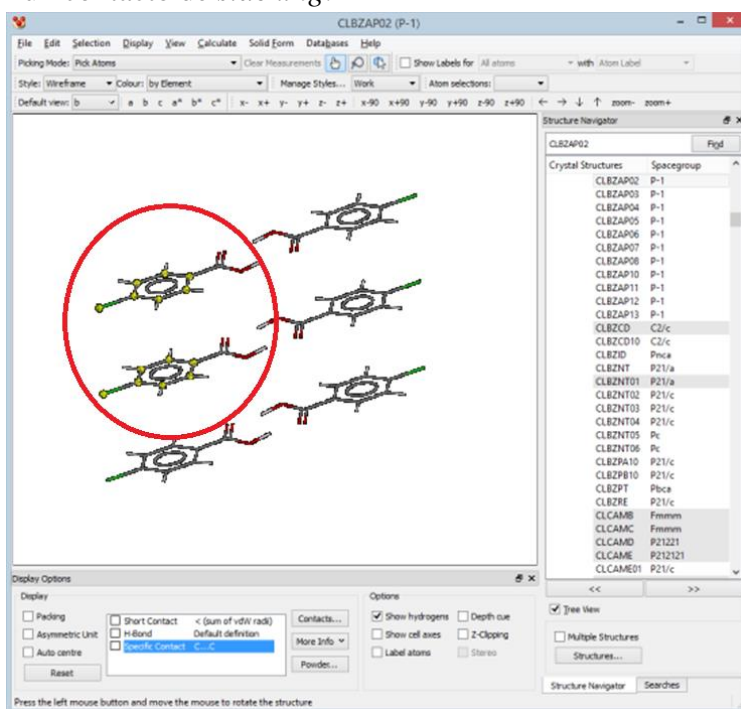


- 1.3.5 A continuación, haga clic en OK. El visualizador mostrará ahora los contactos de *stacking* perpendiculares al anillo unido a hidrógeno. Expanda una vez en cada dirección la estructura a través de estos contactos de *stacking* y verá que una cinta 2D está formada por estas interacciones intermoleculares.

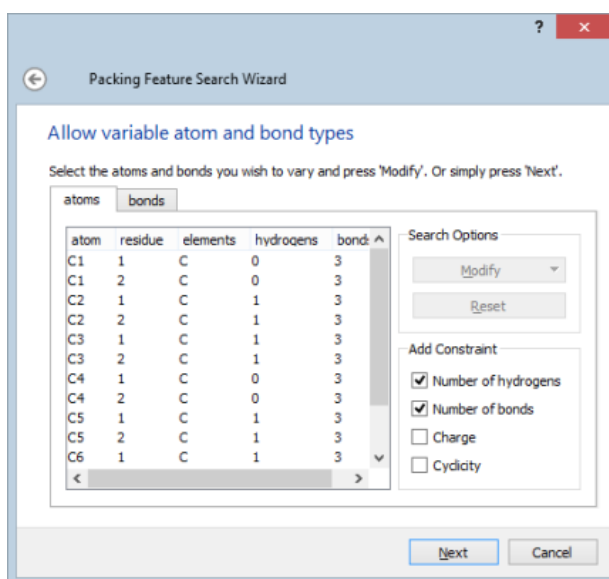


### Búsqueda de Crystal Packing Feature

- 1.3.6 Apague la visualización de los contactos *desclikenado* las casillas de H-Bond y Specific contact. Ahora seleccione los seis átomos de carbono y un átomo de cloro del grupo clorofenilo (átomos C1, C2, C3, C4, C5, C6 y Cl1) en cada una de las dos moléculas relacionadas por un contacto de *stacking*.

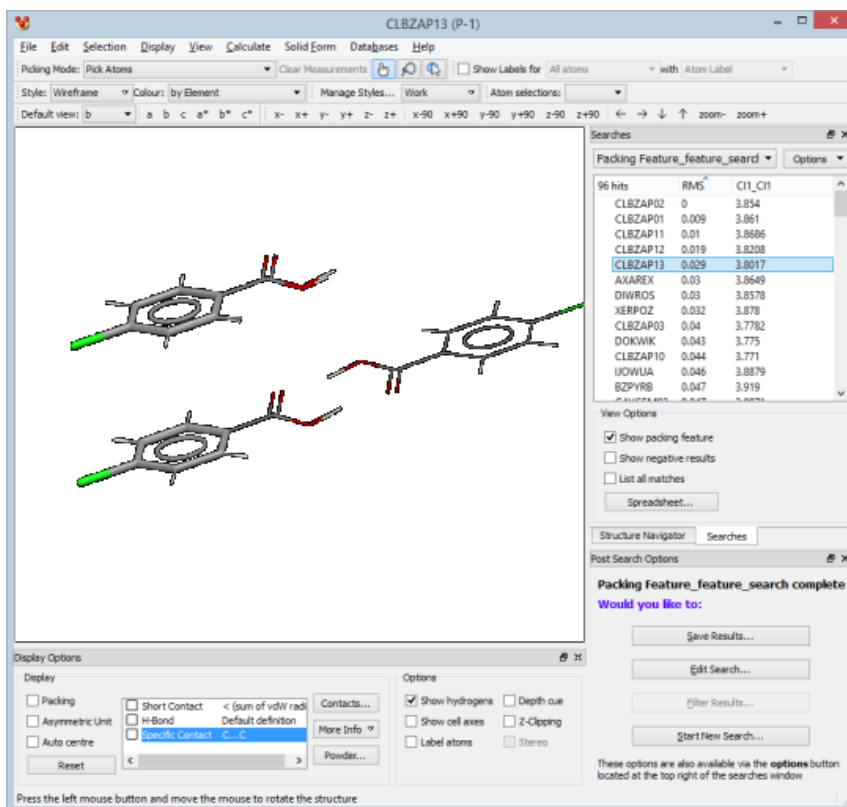


- 1.3.7 Se buscarán características de empaque similares en la CSD, utilizando estos 14 átomos como parámetros de búsqueda. Seleccione **CSD-Materials** en el menú superior y seleccione **Crystal Packing Feature** en el menú desplegable. La primera solapa indicará que ha seleccionado 14 átomos de 2 moléculas de CLBZAP02, haga clic en **Next** para continuar.



- 1.3.8 Ahora relajaremos ligeramente los criterios de búsqueda para permitir que los átomos de cloro sean cualquier halógeno. Para ello, seleccione los dos átomos de cloro en el panel de átomos (para seleccionar varios átomos, haga clic izquierdo mientras mantiene pulsada la tecla **Shift**), haga clic en el botón **Modify** y elija **Element > More > Any Halogen** en los menús desplegables resultantes. Asegúrese de que las casillas *Number of hydrogens* y *Number of bonds* estén marcadas y, a continuación, haga clic en **Next**.
- 1.3.9 Seleccione la similitud **Very high** haciendo clic en el botón de opciones correspondiente en *Level of Geometric Similarity Required* y, a continuación, haga clic en **Next**.
- 1.3.10 En este punto, puede elegir uno o más parámetros geométricos para grabar para cada una de las características de *packing* coincidentes que se encuentran. Seleccione los dos átomos de cloro en la vista 3D y haga clic en **Add Distance >** para elegir este parámetro y, a continuación, haga clic en **Next** para continuar.
- 1.3.11 Agregue la base de datos completa en la sección **Selected Structures** eligiendo la CSD de la lista disponible y haciendo clic en el botón de flecha azul derecha.
- 1.3.12 Haga clic en **Next** y luego especifique los siguientes filtros de búsqueda de bases de datos: **3D coordinates determined, Not disordered, No errors, Not polymeric, R-factor <= 0.1, Only organics**.
- 1.3.13 Haga clic en **Next** seguido de **Start Search** para ejecutar la búsqueda de características de *packing*. Las vistas comenzarán a aparecer en la pestaña *Searches* del Navegador de estructuras.
- 1.3.14 Eche un vistazo a la lista de vistas que se muestran en el Navegador de Estructura. Habrá más de 90 estructuras encontradas con una característica de *packing* similar en la base de datos. Haga clic en el botón RMS en la parte superior de la lista de resultados y los mismos se clasificarán en orden de la desviación RMS entre la característica de *packing* buscada y los resultados encontrados. Verá que la distancia de halógeno a halógeno también se muestra en la lista de resultados para cada estructura.

1.3.15 Una vista a las estructuras con valores RMS bajos (es decir, características de *packing* muy similares) muestra que hay un número de otros refcodes que comienzan con CLBZAP, que son la misma estructura que CLBZAP02, pero determinados en diferentes condiciones experimentales. Haga clic en **Show packing feature** en la parte inferior del panel **Structure Navigator** y la estructura buscada se mostrará superpuesta con la estructura encontrada.



Identificar características de *packing* estrechamente relacionadas

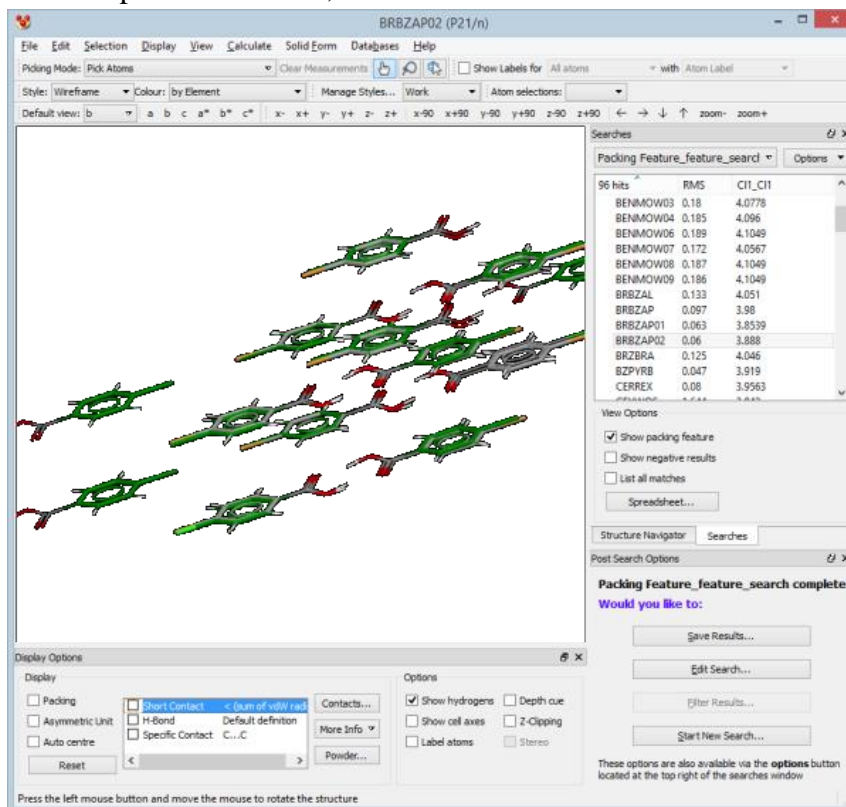
1.3.16 Haga clic en la parte superior de la lista de refcode para volver a ordenar los accesos alfabéticamente por refcode y luego seleccione BRBZAP02, que aparecerá con una desviación RMS de superposición de 0,06 Å. Esta estructura cristalina es del compuesto estrechamente relacionado ácido 4-bromobenzoico y es evidente que las dos estructuras comparten una característica de *packing* de halo-fenilo muy similar. Visualizar los puentes de hidrógeno de la misma manera que antes (seleccionando la opción en la parte inferior de la pantalla) y ampliar los contactos en ambas estructuras demostrando que ambas estructuras contienen el dímero centrosimétrico.

Superposición de estructuras cristalinas

1.3.17 Con el fin de investigar más estas estructuras, es necesario ampliar de nuevo la red de moléculas. Para asegurarse de que las estructuras sean fácilmente distinguibles, haga clic en el botón **Options** en la pestaña **Searches** y seleccione **Hit Highlighting** en el menú desplegable. Cambie el color del *packing* (ácido 4-clorobenzoico) a verde y luego cierre la ventana **Hit Highlighting Style**. La cinta 2D común a estas estructuras puede ser construida expandiendo los contactos como se mostró antes. Al hacer clic en **Short Contacts** en las opciones de visualización se mostrará que también hay una característica de *packing* similar formada por contactos CH---O entre los grupos fenilo y ácido



carboxílico. Estos contactos de *Stacking*, CH---O y los enlaces de puente de hidrógeno forman una doble capa de moléculas, todo lo cual se conserva entre las dos estructuras.



1.3.18 Por último, añadir un contacto específico adicional de la misma manera que antes, excepto entre los átomos de tipo F, Cl, Br, I y con un rango de distancia especificado de 0,0 a 3,9 Å. La expansión de estos contactos mostrará que las capas dobles se apilan de diferentes maneras entre las dos estructuras - los contactos Cl---Cl son aproximadamente lineales, mientras que las interacciones Br---Br tienen un ángulo Br-Br-C de alrededor de 90°. Las estructuras por lo tanto contienen dos planos conservados enteros de moléculas que interactúan, pero la manera que éstos se apilan es diferente. En CLBZAP02 los planos se apilan en un patrón ABABABAB, mientras que en la estructura BRBZAP02 los planos siguen el patrón de apilamiento ABCDABCD.

1.3.19 Finalmente, muestre los modelos de morfología de *Bravais-Friedel-Donnay-Harker* para las dos estructuras haciendo clic en **CSD-Materials**, **Calculation** y seleccionando **Morfología de BFDH**. Curiosamente las orientaciones de doble capa identificadas en las dos estructuras también corresponde a la forma y orientación de la morfología BFDH (ambos son placas), calculada por Mercury. Se especifica que BRBZAP02 tiene un hábito cristalino de placa, disponible en **More Info**, **Structure Information**. El estudio para CLBZAP01 (Miller et al., 1974, J. Am. Chem. Soc., 96, 6334) muestra que estos cristales también crecen como placas, siendo (100) la cara desarrollada del cristal (así como fue sugerido por BFDH).



## ANEXO - Para descargar el programa Mercury última versión 2023

<https://www.ccdc.cam.ac.uk/solutions/software/free-mercury/>

El programa es gratuito para uso académico, pero seguramente para poder bajarlo e instalarlo les pedirá que se registren

Una vez en la página y ya registrados (o no), les muestra lo siguiente; ir a donde está la flecha para la descarga:

CCDC

Deposit Structures | Access Structures | Contact Us | My Account

Home | Solutions | Community | Discover | Consultancy Services | Research | Support and Resources | About

CCDC > Free Mercury

# Free Mercury

Request a demo

Explore more

- Download Free Mercury
- Download Mercury user guide and tutorials
- Blog: What's the difference between free Mercury and full-licence Mercury?

## Crystal Structure Visualization, Exploration and Analysis

Mercury has a comprehensive range of tools for 3D structure visualization and the exploration of crystal packing. It's firmly established as the visualizer of choice within the crystallographic community.

Mercury is available in two versions:

Included: CSD

Fields: Academic Research

Ahí se pueden bajar varias cosas, pero para el Mercury ir a:

Community | Research & Consultancy | Solutions | News & Events | Support & Resources | About Us

HOME / SUPPORT AND RESOURCES / DOWNLOADS

## Downloads

Please see our latest downloads below - you must be logged in to begin downloading.

Legacy Downloads

### CSD-Community

CSD Symmetry
CSD Educational Collection
CellCheckCSD
CSD MOF Collection
Mercury (incorporating enCIFer)

Ahí tendrá la versión que necesitan según su SI:

CSD Portfolio macOS Online Installer	Details	Download
CSD Portfolio linux Online Installer	Details	Download
CSD Portfolio Windows Online Installer	Details	Download

Si no pueden descargarlo, pueden usar un ejecutable para Windows ya descargado que les pasamos en este link de Dropbox:

<https://www.dropbox.com/s/qs1j76sbukt5pxa/CSDInstallerOnline-windows.exe?dl=0>