**Título: The ability of Ex²Box4+ to interact with guests containing π-electron-rich and π-electron-poor moieties.**

## **Ministrante:** Dr. Glaucio Régis Nagurniak – IFM/UFPel

## ****Data:**** 11/04/2018, quarta-feira, 08h30

**Local:** Mini Auditório do CCQFA

**Resumo:** The ability of Ex²Box4+ as a host, able to trap guests containing both π-electron rich (polycyclic aromatic hydrocarbons-PAHs) and π-electron poor (quinoid- and nitro-PAHs) moieties was investigated to shed light on the main factors that control the host–guest (HG) interaction. The nature of the HG interactions was elucidated by energy decomposition (EDA-NOCV), noncovalent interaction (NCI), and magnetic response analyses. EDA-NOCV reveals that dispersion contributions are the most significant to sustain the HG interaction, while electrostatic and orbital contributions are very tiny. In fact, no significant covalent character in the HG interactions was observed. The obtained results point strictly to NCIs, modulated by dispersion contributions. Regardless of whether the guests contain π-electron-rich or p-electron-poor moieties, and no significant charge-transfer was observed. All in all, HG interactions are predominantly modulated by π- π stacking.

**Sobre a palestrante:** Atualmente realiza estágio de pós-doutoramento em física da matéria condensada no instituto de física da Universidade Federal de Pelotas (UFPEL). Foi professor substituto durante dois anos no departamento de química da Universidade Federal de Santa Catarina (DQ/UFSC). É doutor em Química (físico-química) pelo DQ/UFSC, onde estudou através de métodos teóricos (mecânica quântica/ teoria do funcional da densidade - DFT) a natureza física da interação 'hóspede-hospedeiro' de hidrocarbonetos policíclicos aromáticos em estruturas supramoleculares. Durante o mestrado em Química (físico-química) pelo Instituto de Química de São Carlos (IQSC/USP) estudou a QSAR de compostos que atuam no receptor μ-opioide. Tem experiência em análise multivariada, métodos de decomposição de energia de interação de fragmentos moleculares e docking molecular.