



Molecular Simulations and Engineering
2nd edition

Book of abstracts

Politecnico di Milano
30 September 2016



POLITECNICO
MILANO 1863



Insights into the formation of chiral second sphere coordination complexes with aromatic tris amines: combined single crystal X-ray crystallography and molecular modeling analyses

Antonino Famulari, Massimo Cametti and Stefano Valdo Meille (Politecnico di Milano), and Javier Martí-Rujas (Center for Nano Science and Technology@Polimi, Istituto Italiano di Tecnologia)

Control over the formation of non-centrosymmetric chiral materials is highly desirable due to their potential applications in areas such as ferroelectricity, piezo- and pyroelectricity, and second harmonic generation.[1] The development of a reliable approach to induce the formation of a chiral material from achiral molecules remains a great challenge in the field of molecular chemistry.[2] Furthermore, the understanding of the driving forces behind those aggregations is a prerequisite for the design and construction of chiral molecular arrays. C₃-symmetrical tripodal molecules have emerged as attractive organic frameworks for the construction of chiral coordination compounds.[3] In the present contribution we report about a family of isostructural, chiral supramolecular networks obtained in the solid state by exploiting second sphere coordination interactions in the self-assembly of 2 achiral tris amines with tetrahalometallate and halide ions. Quantum-Mechanical calculations (including the usage of approaches specific for crystalline solid phases) provided important insights into the intramolecular and packing interactions which determine chirality, pointing to a direct effect of the methyl groups of the central benzene ring of the tris amines. [4]

- [1] (a) P. A. Maggard, C. L. Stern and K. R. Poeppelmeier, *J. Am. Chem. Soc.*, 2001, 123, 7742–7743; (b) M. Liu, L. Zhang and T. Wang, *Chem. Rev.*, 2015, DOI: 10.1021/ Q5 cr500671p.
[2] P. S. Halasyamani and K. R. Poeppelmeyer, *Chem. Mater.*, 1998, 10, 2753–2769.
[3] Z. Dai and J. W. Canary, *New J. Chem.*, 2007, 31, 1708–1718.
[4] H. Yu, L. Li, J. Gao, J. Tong, W. Zheng, M. Cametti, A. Famulari, S.V. Meille, F. Guo and J. Martí-Rujas *Journal Article Dalton Trans.*, 2016,44, 15960-15965. DOI: 10.1039/C5DT02387D.

Participants to MolSimEng 2016

Surname, Name	Institutional Affiliation
Achilli, Simona	Università Cattolica del Sacro Cuore
Africa, Pasquale	Politecnico di Milano
Aieta, Chiara Donatella	Università degli Studi di Milano
Albinati, Alberto	Università degli Studi di Milano
Antonino, Famulari	Politecnico di Milano
Baby, Anu	Università degli Studi di Milano-Bicocca
Benfenati, Francesco	Università degli Studi di Brescia
Bertocco, Alessio	Politecnico di Milano
Biscari, Paolo	Politecnico di Milano
Bonaventura, Luca	Politecnico di Milano
Brambilla, Luigi	Politecnico di Milano
Candiani, Gabriele	Politecnico di Milano
Caretto, Alessio	Politecnico di Milano
Casalegno, Mosè	Politecnico di Milano
Casciola, Carlo Massimo	Università di Roma "La Sapienza"
Castiglione, Franca	Politecnico di Milano
Castiglioni, Chiara	Politecnico di Milano
Cazzaniga, Marco	ISTM CNR, Milano
Ceotto, Michele	Università degli Studi di Milano
Ceresoli, Davide	CNR ISTM
Ciccotti, Giovanni	IAC-CNR, Roma
Conte, Riccardo	Università degli Studi di Milano
Dapiaggi, Federico	Università degli Studi di Milano
Datteo, Martina	Università degli Studi di Milano-Bicocca
de Falco, Carlo	Politecnico di Milano
De Nicola, Antonio	Università degli Studi di Salerno
De Vita, Alessandro	Università di Trieste e King's College London
Di Carlo, Antonio	CECAM-IT-SIMUL
Di Liberto, Giovanni	Università degli Studi di Milano
Di Valentin, Cristiana	Università degli Studi di Milano-Bicocca
Ding, Zhao-Bin	Politecnico di Milano
Dini, Daniele	Imperial College London
Fortunato, Giovanni	Politecnico di Milano
Fratesi, Guido	Università degli Studi di Milano
Frezzotti, Aldo	Politecnico di Milano
Gabas, Fabio	Università degli Studi di Milano
Gallo, Mirko	Università di Roma "La Sapienza"
Ganazzoli, Fabio	Politecnico di Milano
Gramegna, Nicola	EnginSoft S.p.A.
Invernizzi, Marta	Politecnico di Milano
Landella, Andrea Giuseppe	Politecnico di Milano
Li, Huaqing	Università degli Studi di Milano
Lidi, Alfio	Comune di Milano
Locatelli, Giulia	Cooper

Maestri, Matteo	Politecnico di Milano
Maghsoumi, Ali	Politecnico di Milano
Mahmoud, Agnes	Università degli Studi di Milano
Marti-Rujas, Javier	IIT - Center for Nano Science and Technology
Masoero, Enrico	Newcastle University
Meille, Stefano Valdo	Politecnico di Milano
Melchior, Andrea	Università di Udine
Mercurio, Giovanni	JRC Ispra
Milani, Alberto	Politecnico di Milano
Milano, Giuseppe	Università degli Studi di Salerno
Molteni, Elena	Università degli Studi di Milano
Nicola, Gramegna	EnginSoft S.p.A.
Oggioni, Luca	Politecnico di Milano
Pastore, Raffaele	CNR-SPIN, Napoli
Pelucchi, Matteo	Politecnico di Milano
Pietralunga, Silvia M.	CNR-IFN
Radice, Stefano	Solvay Specialty Polymers
Raffaini, Giuseppina	Politecnico di Milano
Raos, Guido	Politecnico di Milano
Ravikumar, Abhilash	Università degli Studi di Milano-Bicocca
Rigoldi, Federica	Politecnico di Milano
Sacco, Riccardo	Politecnico di Milano
Soave, Raffaella	ISTM-CNR
Tartaglino, Ugo	Pirelli Tyre S.p.A.
Tinti, Antonio	Università di Roma "La Sapienza"
Tommasini, Matteo	Politecnico di Milano
Turzi, Stefano	Politecnico di Milano
Venturini, Francesco	Solvay