

КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКИЕ ДАННЫЕ ОРГАНИЧЕСКИХ
 СОЕДИНЕНИЙ

III. ПАРАМЕТРЫ ЭЛЕМЕНТАРНОЙ ЯЧЕЙКИ И ПРОСТРАНСТВЕННЫЕ
 ГРУППЫ НЕКОТОРЫХ ПРОИЗВОДНЫХ СУКЦИНИМИДА

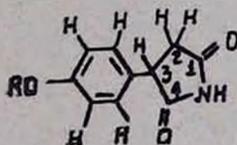
А. Л. МНДЖОЯН, Р. Л. АВОЯН, О. Л. МНДЖОЯН и С. А. АВЕТИСЯН

Институт тонкой органической химии АН Армянской ССР

Поступило 26 III 1970

Рентгенографически определены параметры элементарной ячейки и пространственные группы семи *n*-алкоксифенилсукцинимидов с общей формулой $R-C_{10}H_8O_2$.
 Табл. 1, библиографические ссылки 5.

В продолжение работ по кристаллографическим данным органических соединений [1] нами рентгенографически (методы Лауэ, качания и неискаженного фотографирования обратной решетки, излучение железное, $\lambda = 1.9373 \text{ \AA}$) определены параметры элементарной ячейки и пространственные группы ранее синтезированных [2] некоторых *n*-алкоксисукцинимидов с общей формулой



где $R = CH_3$ (I), C_2H_5 (II), C_3H_7 (III), C_4H_9 (IV), C_5H_{13} (V), *изо*- C_4H_9 (VI) и *изо*- C_5H_{11} (VII). Соединения I—VII при перекристаллизации из водного раствора этилового спирта дают очень толстые прозрачные кристаллики моноклинной сингонии, вытянутые вдоль кристаллографической оси *b*. Все они имеют самую распространенную пространственную группу $P2_1/c$ и их молекулы в кристаллах, естественно, занимают общее положение (на что указывают собственная симметрия молекул, а также число молекул в элементарной ячейке). Значения параметров элементарных ячеек, число молекул в них (*N*) и вычисленные плотности кристаллов ($d_{\text{вч.}}$) приведены в таблице.

В литературе имеются некоторые примеры определения кристаллических и молекулярных структур сукцинимидов (NN^1 -дисукцинимидила [3], *N*-хлорсукцинимид [4], самого сукцинимид [5] и т. д.). Все эти данные сводятся к тому, что из-за тригональной координации атома

N и делокализации неподеленной пары электронов в системе $O=C-N-C=O$ сукцинимидная система (без учета атомов H) становится приблизительно плоской, максимальное отклонение атомов кольца от его средней плоскости не превышает 0,08 Å.

Таблица

№№	Название соединения	a, Å	b, Å	c, Å	β	V, Å ³	N	$d_{\text{выч.}}$, г/см ³
I	<i>l</i> -Метоксифенилсукцинимид	7,17± ±0,03	5,98± ±0,02	23,21± ±0,08	90°00'± ±20'	995	4	1,377
II	<i>l</i> -Этоксифенилсукцинимид	14,31± ±0,05	5,45± ±0,02	14,31± ±0,05	97°40'± ±30'	1106	4	1,324
III	<i>l</i> -Пропоксифенилсукцинимид	14,46± ±0,05	5,33± ±0,02	15,61± ±0,05	90°00'± ±30'	1203	4	1,295
IV	<i>l</i> -Бутоксифенилсукцинимид	20,62± ±0,06	5,51± ±0,02	12,10± ±0,03	101°50'± ±30'	1345	4	1,228
V	<i>l</i> -Гексилосифенилсукцинимид	23,56± ±0,06	5,62± ±0,02	11,65± ±0,05	96°00'± ±30'	1514	4	1,199
VI	<i>l</i> -Изобутоксифенилсукцинимид	20,03± ±0,06	5,46± ±0,02	12,24± ±0,03	90°00'± ±30'	1339	4	1,234
VII	<i>l</i> -Изовмилоксифенилсукцинимид	22,52± ±0,08	5,36± ±0,03	12,18± ±0,03	95°40'± ±20'	1462	4	1,194

В идеальной модели молекул *l*-алкоксифенилсукцинимидов связь, соединяющая кольца, будет копланарной с бензольным (но не с сукцинимидным) кольцом. Средние плоскости сукцинимидного кольца (при допущении его плоской формы) и боковой (в случае изопроизводных — прямой части) цепи будут перпендикулярными бензольному ядру. Однако, приведенные кристаллографические данные показывают, что удлинение и разветвление боковой цепи прямым образом не влияет на величину периода *b*. По-видимому, боковая цепь приблизительно параллельна плоскости XOZ кристалла, а с последней бензольное кольцо может образовать углы не более чем 65 (I), 55,5 (II), 53,5 (III) 57 (IV), 58 (V), 55,5 (V) и 54° (VII), поскольку минимальный размер бензольного кольца 6,6 Å значительно больше кратчайшего размера ячейки, колеблющейся в интервале ст 5,33 до 5,98 Å. Отсюда следует, что среди алкоксифенилсукцинимидов могут быть такие, у которых плоскости боковой цепи и бензольного кольца взаимно не перпендикулярны. Сукцинимидное кольцо (из-за больших размеров [3—5]) также не может быть перпендикулярным плоскости XOZ, что приведет к уменьшению угла между кольцами, росту невалентного взаимодействия между ними и деформации формально тетраэдрических экзоциклических углов при атоме C₃.

Имеющиеся данные недостаточны для надежного определения формы и размеров молекул *l*-алкоксифенилсукцинимидов и их ориентации в элементарной ячейке, что возможно только при полном рентгеноструктурном исследовании. Однако не вызывает сомнения, что ориента-

ция попарно молекул II и III, IV и V, VI и VII в кристалле аналогична, что видно из сопоставления кристаллографических данных (табл.).

Плотность кристаллов с ростом R обычно падает. Явление изоструктурности не наблюдается.

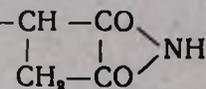
Авторы выражают благодарность С. С. Фарманяну за участие в экспериментальной работе.

ՕՐԳԱՆԱԿԱՆ ՄԻԱՅՈՒԹՅՈՒՆՆԵՐԻ ԲՅՈՒՐԵՂԱԳԻՏԱԿԱՆ ՏՎՅԱԼՆԵՐԸ

III. ՍՈՒԿՑԻՆԻՄԻԴԻ ՄԻ ԲԱՆԻ ԱՍԱՆՑԱԼՆԵՐԻ ՏԱՐՐԱԿԱՆ ԲՋԻՋՆԵՐԻ ՊԱՐԱՄԵՏՐՆԵՐԸ ԵՎ ՏԱՐԱԾԱԿԱՆ ԽՄԲԵՐԸ

Ա. Լ. ՄԵՋՈՅԱՆ, Զ. Լ. ԱՎՈՅԱՆ, Զ. Լ. ՄԵՋՈՅԱՆ և Ս. Ա. ԱՎԵՏԻՍՅԱՆ

Ա Մ Փ Ն Փ Ն Ի Մ

Ռենտգենոգրաֆիկ եղանակով որոշվել են $RO-C_6H_4-CH-CO$ 

ընդհանուր ֆորմուլա ունեցող լոթ պ-ալկոքսիֆենիլսուկցինիմիդների տարրական բջիջների պարամետրները և տարածական խմբերը:

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. P. Л. Авоян, О. Л. Мнджоян, Арм. хим. ж., 22, 574 (1969).
2. С. А. Аветисян, О. Л. Мнджоян, Арм. хим. ж., 23, 354 (1970).
3. G. S. D. King, J. Chem. Soc., B, 1224, (1966).
4. R. N. Brown, Acta Cryst., 14, 711 (1961).
5. R. Mason, Acta Cryst., 14, 720 (1961).