

КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

УДК 539.26+547.631.7

КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА БРОМГИДРАТА
 γ-ДИЭТИЛАМИНОПРОПИЛОВОГО ЭФИРА
 α-ЭТОКСИДИФЕНИЛУКСУСНОЙ КИСЛОТЫ

Р. Л. АВОЯН, А. А. АВЕТИСЯН, О. Л. МНДЖОЯН, Э. Р. БАГДАСАРЯН и
 Э. Г. АРУТЮНЯН

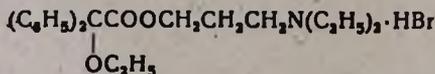
Институт тонкой органической химии АН Армянской ССР (Ереван)

Поступило 3 VI 1970

Определена трехмерная кристаллическая структура гидробромида γ-диэтиламинопропилового эфира α-этоксидифенилуксусной кислоты, путем рентгеноструктурного анализа.

Рис. 1, табл. 1, библиограф. ссылок 2.

В продолжение работ по изучению физиологически активных четвертичных аммониевых соединений [1] нами проведено трехмерное рентгеноструктурное исследование гидробромида γ-диэтиламинопропилового эфира α-этоксидифенилуксусной кислоты,



аналога применяемого в медицинской практике препарата этпенала [2].

Из водного ацетона препарат выделяется в виде тонких прозрачных пластинок, вытянутых вдоль кристаллографической оси *b* моноклинной сингонии. По систематическим погасаниям отражений типа *hkl*, *hol* и око установлено, что пространственная группа является *P2₁/c*. Параметры элементарной ячейки (методы Лауэ, качания и фотографирования обратной решетки, λCu) следующие: *a* = 19,87 ± 0,06 Å; *b* = 7,71 ± 0,02 Å; *c* = 16,78 ± 0,05 Å; β = 114°30' ± 15'; *d*_{изм.} = 1,15 г/см³; *d*_{вмч.} = 1,166 г/см³, *N* = 4.

Объемный эксперимент для рентгеноструктурного анализа (развертки слоевых линий *hol* + *h3l*, приведение к общему масштабу по отражениям типа *hko*) проводился на камере РГНС, на неотфильтрованном медном излучении. Интенсивности пятен оценивались визуально, сравнением со стандартной шкалой почернения. Число независимых ненулевых отражений равно ~640. При пересчете интенсивностей отражений в структурные факторы учтены факторы Лоренца и поляризации.

Структура расшифрована методом тяжелого атома. Уточнение проведено последовательными синтесами Фурье и отчасти методом наименьших квадратов до $R=20,5\%$ ($V=6,5A^2$).

Таблица

Атом	X	Y	Z	Атом	X	Y	Z
Br	0,445	0,200	0,105	C ₁₀	0,142	0,333	0,217
O ₁	0,303	0,233	0,268	C ₁₁	0,177	0,517	0,267
O ₂	0,243	0,023	0,272	C ₁₂	0,163	0,633	0,300
O ₃	0,112	0,070	0,137	C ₁₃	0,100	0,567	0,333
N ₁	0,433	0,799	0,083	C ₁₄	0,062	0,433	0,295
C ₁	0,075	0,817	0,058	C ₁₅	0,092	0,300	0,243
C ₂	0,132	0,947	0,083	C ₁₆	0,239	0,150	0,237
C ₃	0,170	0,203	0,168	C ₁₇	0,382	0,183	0,350
C ₄	0,168	0,313	0,085	C ₁₈	0,438	0,267	0,325
C ₅	0,245	0,267	0,082	C ₁₉	0,503	0,683	0,083
C ₆	0,228	0,133	0,492	C ₂₀	0,418	0,717	0,160
C ₇	0,183	0,050	0,433	C ₂₁	0,350	0,783	0,175
C ₈	0,102	0,067	0,433	C ₂₂	0,357	0,747	0
C ₉	0,108	0,427	0,017	C ₂₃	0,365	0,647	0,442

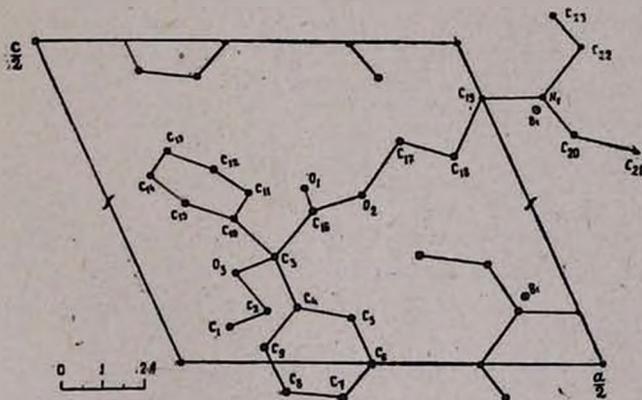


Рис.

Координаты атомов приведены в таблице, проекция катиона и положение иона брома изображены на рисунке.

Структура бромидрата γ -диэтиламинопропилового эфира α -этоксидифенилуксусной кислоты подлежит дальнейшему уточнению.

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. А. Л. Мнджоян, Р. Л. Авоян, Э. Г. Арутюнян, Арм. хим. ж., 23, (1970).
2. О. Л. Мнджоян, Э. Р. Багдасарян, Арм. хим. ж., 19, 176 (1966).