

Таблица 1 - Параметры кристаллов соединения I и условия рентгеноструктурного эксперимента

Соединение, брутто-формула	Ftordinitroethylmet hylphuroxan, C ₅ H ₃ FN ₄ O ₆
Молекулярный вес (g/mol)	236.13
Сингония	Моноклинная
Пространственная группа	P2 ₁ /n
Z, Z'	4, 1
Параметры элементарной ячейки, Å	a = 6.1506(11) b = 14.213(3), c = 10.4948(19)
Объем, Å ³	897.9(3)
F(000)	480
Плотность (выч.), г/см ³	1.747
Коэффициент поглощения, см ⁻¹	1.72
Область измерений по углу θ , град	2.45 ≤ θ ≤ 28.73
Измерено отражений	9954
Число наблюдаемых независимых отражений с I > 2 σ (I) [R(int)]	2163 [R(int) = 0.0275]
Reflections [I > 2 σ (I)]	1704
Значения факторов расходимости, R ₁ / wR ₂ [I > 2 σ (I)]	0.0378 / 0.1140
R ₁ / wR ₂ (все данные)	0.0489 / 0.1214
Параметр подгонки (goodness of fit on F ²)	1.059
Максимальный и минимальный пики, e ⁻ Å ⁻³	0.227 / -0.165

Таблица 2 - Длины связей в молекуле соединения I

Связь	Длина связи, Å
F52–C51	1.307(2)
N54–C51	1.535(2)
O3–N2	1.433(2)
O54B–N54	1.191(2)
N2–C1	1.308(1)
N4–C5	1.299(2)
N53–C51	1.541(1)
C1–C10	1.471(2)
O20–N2	1.239(2)
C5–C50	1.494(2)
O53A–N53	1.202(2)
C50–C51	1.493(2)
O53B–N53	1.203(1)
O54A–N54	1.198(2)
C1–C5	1.408(2)
O3–N4	1.371(2)

Параметры взаимодействия C50–H50B...O20' следующие: d(C50...O20') 3.246(2) Å, d(H50B...O20') 2.45(1) Å, angle ∠(C50–H50B...O20') 141(1)°, (операция симметрии 5/2-x, -1/2+y, 3/2-z), взаимодействия C50–H50A...O20'' следующие: d(C50...O20'') 3.637(2) Å, d(H50A...O20'') 2.71(1)Å,

angle ∠(C50–H50A...O20'') 159(1)°, (-1/2+x, 1/2-y, -1/2+z).

Участие же каждой молекулы в 4 таких водородных связях (как донор и как акцептор) приводит к связыванию Н-тетрамеров между собой и образованию в кристалле гофрированного слоя молекул (рис.3). Связывание же слоев между собой осуществляется взаимодействиями двух других типов: взаимодействиями фтор...фтор с расстояниями F52...F52' равными 2.829(1)Å) и достаточно необычным взаимодействием между одним из атомов кислорода нитрогруппы O53B и π-электронной системой фуросанового цикла с расстоянием O53B...Cg (центр тяжести цикла) равным 3.014(1) Å.

Совокупное влияние подобных взаимодействий приводит к достаточно плотной упаковке молекул в кристалле и отсутствию пустот, потенциально доступных для сольватных молекул, – рассчитанный коэффициент упаковки равен 71.5%.

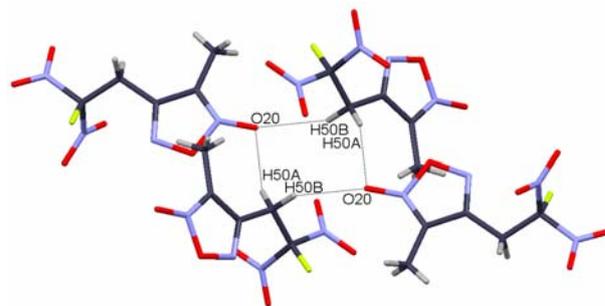


Рис. 2 - Н-тетрамер в кристалле соединения I. Н-связи показаны пунктирными линиями, вид примерно вдоль оси *oa*

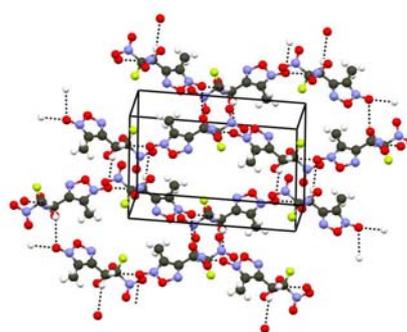


Рис. 3 - Гофрированный слой Н-связанных молекул в кристалле соединения I. Водородные связи показаны пунктиром

Литература

1. Гуревич П.А. Особенности кислотного гидролиза 2 – амино – 4 – (метилсульфо-имидаил)-бутановой кислоты / П.А. Гуревич, Б.П. Струнин, А.Т. Губайдуллин, Т.Б. Пахомова, Ю.Е. Сапожников, Л.Ф. Саттарова, И.Б. Струнина, П.В. Толмачев, Ф.И. Гусейнов // Вестник Казан. Технол. ун-та. – 2012. – т.15 №3. – с. 7-11.

2. Гарифзянова Г.Г., Храпковский М.Г. Молекулярная структура и реакции фрагментации катион-радикалов 1-метил-2-этилбензола и 1-метил-3-этилбензола // Вестник Казан. Технол.ун-та. – 2011. - №23.- с. 11-16.
3. G.M. Sheldrick, SHELXS 97 Program for Solution of CrystalStructure, University of Goettingen, Germany, 1997.
4. G.M. Sheldrick, SHELXL97 a computer program for crystal structure determination, University of Gottingen, 1997.
5. APEX2 (Version 2.1), SAINTPlus. Data Reduction and Correction Program (Version 7.31A, Bruker Advansed X-ray Solutions, BrukerAXS Inc., Madison, Wisconsin, USA, 2006.
6. L.J. Farrugia, J. Appl. Crystallogr. 32 (1999) 837.
7. I. J. Bruno, J. C. Cole, P. R. Edgington, M. K. Kessler, C. F. Macrae, P. McCabe, J. Pearson, R. Taylor, Acta Crystallogr. B58 (2002) 389.
8. C.F. Macrae, P.R. Edgington, P. McCabe, E. Pidcock, G.P. Shields, R.Taylor, M. Towler, J. van de Streek, J. Appl. Crystallogr. 39 (2006) 453.

© **А. Р. Хайруллин** - асп. каф. ТТХВ КНИТУ, artur89-ks@yandex.ru; **В. Г. Никитин** - д.х.н., проф. каф. ХТОСА КНИТУ ttxb@mail.ru; **А. Т. Губайдуллин** - д.х.н., профессор, ИОФХ aidar@iopc.ru; **Н. С. Хайруллина** - к.т.н., доцент, каф. ТТХВ КНИТУ, nadin0711@inbox.ru; **Д. И. Хамидуллин** - к.т.н., доцент, «Татхимфармпрепарат», dinart78@mail.ru.