

Стэкинг-взаимодействия в гомомолекулярных кристаллах 3,6-дизамещенных s-тетразинов

© Салмина Елена Сергеевна,¹⁺ Слепухин Павел Александрович,¹
Русинов Геннадий Леонидович,¹ Гришина Мария Александровна^{2*}
и Потемкин Владимир Александрович^{2*}

¹ Лаборатория гетероциклических соединений. Институт органического синтеза им. И.Я. Постовского, УрО РАН. Ул. С. Ковалевской, 22; Академическая, 20. г. Екатеринбург, 620041. Тел.: (343) 362-32-01.

² Фармацевтический факультет Челябинской государственной медицинской академии. Ул. Воровского, 64. г. Челябинск, 454092. Тел.: (351) 232-73-71.

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: дизамещенные 1,2,4,5-тетразины, межмолекулярные взаимодействия, стэкинг-взаимодействия, ортогональная упаковка.

Аннотация

Рассмотрены 32 кристаллические структуры, образованные органическими молекулами, содержащими s-тетразиновый фрагмент. Выделены и количественно описаны кристаллические мотивы, формирующиеся за счет стэкинг-взаимодействий и ортогональных контактов ароматических систем s-тетразинового кольца. Отмечено, что введение в s-тетразиновый цикл ароматических заместителей приводит к формированию «стопочных» структур, тогда как введение алифатических заместителей приводит к «переключению» стэкинга в ортогональную упаковку.