

Латеральные взаимодействия в гомомолекулярных кристаллах органических соединений, содержащих s-тетразиновый фрагмент

© 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, водородные связи, квантово-топологический анализ.

Аннотация

Рассмотрены гомомолекулярные кристаллы органических соединений, содержащих s-тетразиновый фрагмент. Описаны основные тенденции в способах молекулярной упаковки в рассматриваемых кристаллах в зависимости от строения молекулы s-тетразина. Выделены основные структурные мотивы и межмолекулярные взаимодействия, ответственные за их образование. Количественно описаны все виды невалентных атом-атомных взаимодействий, которые формируются в исследуемых кристаллах (C...C, N...N, O...O, Cl...Cl, C...O, C...Cl, N...O, H...H, C...H, N...H, O...H, Cl...H, S...H).