ЗНЧ | ЗАБАБАХИНСКИЕ НАУЧНЫЕ ЧТЕНИЯ 2023

СТРУКТУРА И ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА 1-(ДИФТОРАМИНО)ДИНИТРОМЕТИЛ-3,4-ДИНИТРО-1*H*-ПИРАЗОЛА

К. Ю. Супоницкий[1], Т. К. Шкинева[1], И. Л. Далингер[1], А. В. Станкевич[2]

[1] Институт органической химии им. Зеленского, РАН, Москва, Россия

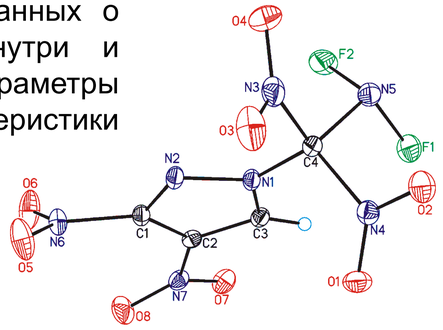
[2] Федеральное государственное унитарное предприятие «Российский Федеральный Ядерный Центр – Всероссийский НИИ технической физики имени академика Е.И. Забабахина», Снежинск, Россия

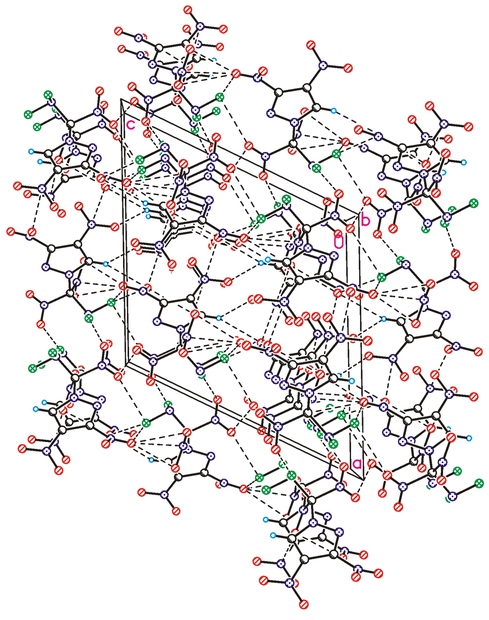
Цель – изучение молекулярного строения и кристаллической структуры 1-(дифторамино)динитрометил-3,4-динитро-1*H*-пиразола

Кристаллическая структура, а также строение молекул синтезируемых веществ, полученные из эксперимента являются основной информацией, показывающей предположения о химической чистоте вещества, электронных свойствах и природе образования кристаллов. Получение количественных данных о строении молекул и кристаллов: тип и длина внутри и межмолекулярных связей, валентные углы, параметры элементарной ячейки, а также субструктурные характеристики определяются методами рентгеновской дифракции.

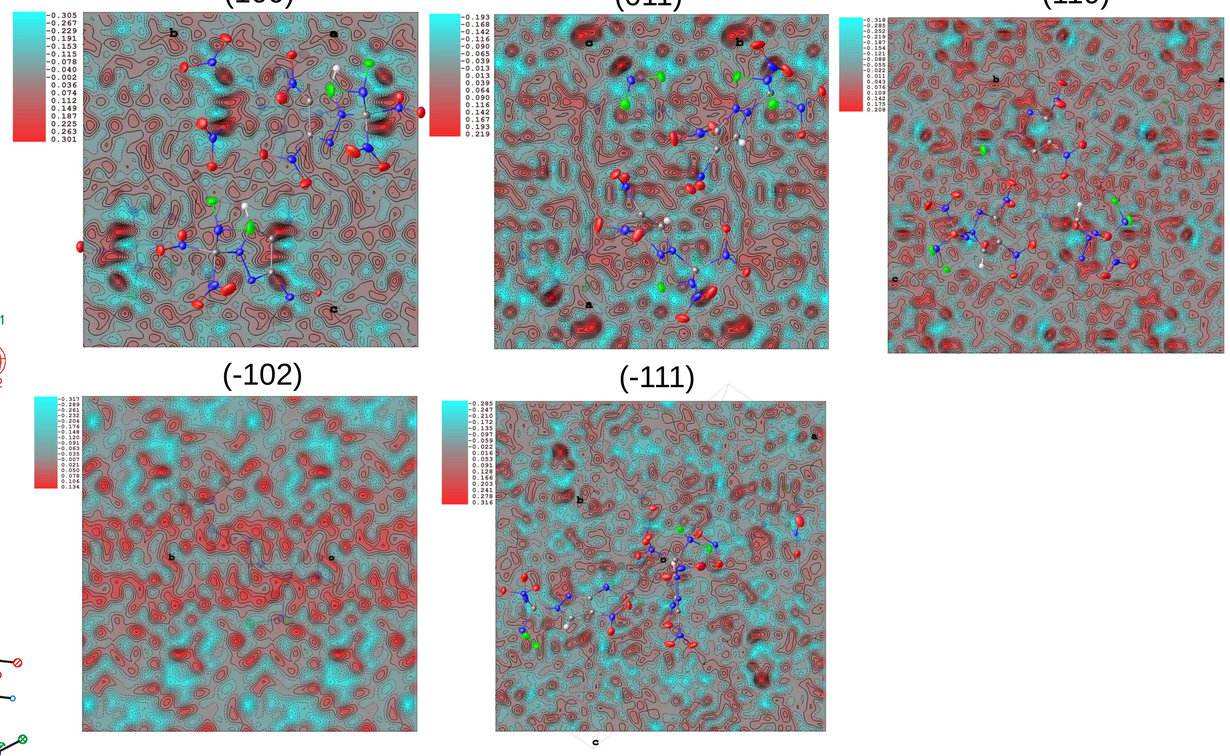
Параметр	Значение
Брутто-формула	$C_4HN_7O_8F_2$
Молекулярная масса	313.12
Кристаллическая система	Моноклинная
Температура, К	100
Пространственная группа	$P2_1/c$
a, Å	13.1857(3)
b, Å	6.7793(2)
c, Å	13.0949(3)
β, град.	116.8665(8)
V, Å^3	1044,20(5)
Z	4
d_{cryst}, г·см$^{-3}$	1.992
Коэфф. поглощения μ, мм$^{-1}$	0.209
F(000)	624
Инт. сканирования по θ, град	3.12 – 28.84
Число независимых отражений	2729
R_{int}	0.0279
Количество уточняемых параметров	194
Количество отражений с I ≥ 2σ(I)	2364
Полнота массива отражений, %	99.9
GOOF	1.020
Сходимость уточнения (R_1(F))[a] по отражениям с I ≥ 2σ(I)	0.0305
Сходимость уточнения по всем отражениям (wR_2(F^2)[b]	0.0770
Остаточный мин./макс., e/Å^3	0.385/-0.275

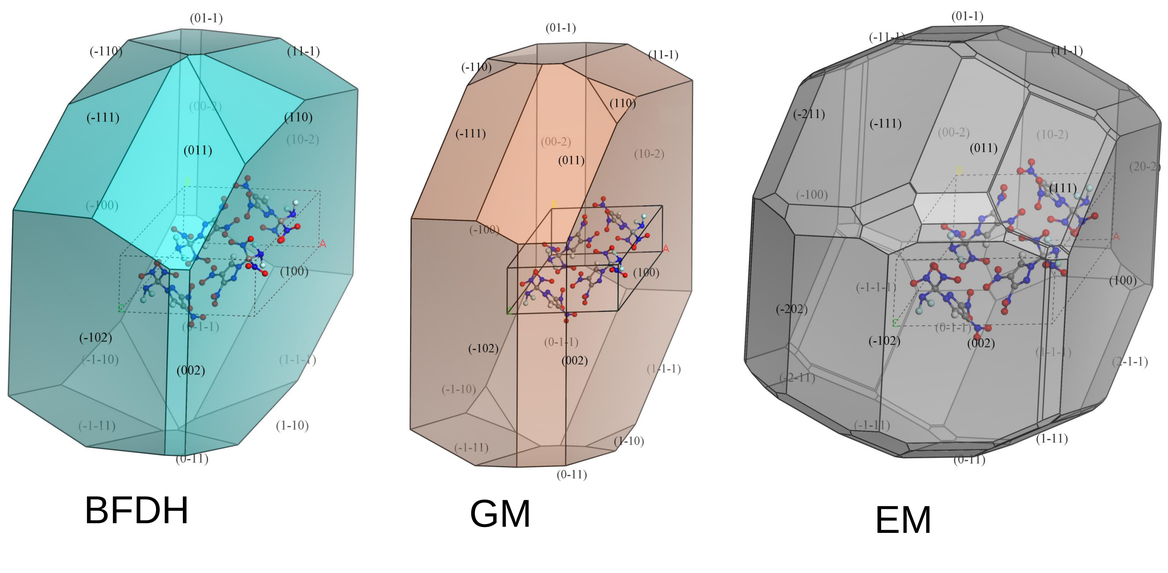
[a] $R_1 = \sum|F_o - |F_c||/\sum(F_o)$; [b] $wR_2 = (\sum[w(F_o^2 - F_c^2)^2]/\sum[w(F_o^2)^2]^{1/2}$





Электронные свойства





Кристаллическая упаковка соединения стабилизирована исключительно слабыми взаимодействиями: O(N)…O(N) и слабыми O…π контактами и водородными связями C-H…O.

[1] I.L. Dalinger, A.Kh. Shakhnes, K.A. Monogarov, K.Yu. Suponitsky, A.B. Sheremetev, “Novel high energetic pyrazoles: N-fluorodinitromethyl and N-(difluoroamino)dinitro-methyl derivatives”, *Mendeleev. Commun.*, **2015**, 25, № 6, 429–431.