

COMUNICACION CORTA CARACTERIZACION CRISTALOGRAFICA DEL 1-(P-METOXI)-BENZOIL-3- -FENILTIOUREA (C₁₅H₁₄O₂SN₂)

R. Guardiola, J. Duque, A. Martín y R. Hernández

Departamento de Física-Matemática, ISMM-Moa y Departamento de Química Analítica, Centro Nacional de Investigaciones Científicas, Ciudad de La Habana, Cuba

Recibido: 9 de enero de 1987

El compuesto C₁₅H₁₄O₂SN₂ se sintetizó mediante la adición de cantidades equivalentes de cloro de p-metoxi benzoilo, tiocianato de amonio y anilina utilizando acetona como solvente, según se describe en la literatura.^{1,2}

Morfología. Los cristales son transparentes e incoloros, alargados en forma de listón a lo largo de la dirección [001].

Resultados cristalográficos. La singonía, parámetros reticulares y grupo espacial de simetría se determinaron en un difractómetro manual de monocristales URS-50. El patrón de difracción de polvo (Tabla I) se obtuvo en el difractómetro HZG-4 (Karl Zeiss) utilizando radiación K α Fe. Para la asignación de índices de Miller se empleó el programa de computación "INDEX".

El compuesto cristaliza en el sistema ortorrómbico:

$$a = 1,944\ 8\ (8)\ \text{nm} \quad b = 1,158\ 1\ (6)\ \text{nm} \quad c = 1,266\ 6\ (6)\ \text{nm}$$

$$PM = 286\ \text{g/mol} \quad V = 2,852\ 729\ \text{nm}^3 \quad Z = 8$$

Las extinciones sistemáticas de las reflexiones (h k l) donde h = 2n + 1; (h 0 l) donde l = 2n + 1 y (0 k l) donde k = 2n + 1; indican de forma unívoca que el grupo espacial de simetría es Pbc_a. La densidad experimental fue determinada por el método picométrico y su valor es:

$$d_{\text{exp.}} = 1,4\ \text{g/cm}^3$$

El valor de la densidad calculada es:

$$d_{\text{calc.}} = 1,23\ \text{g/cm}^3$$

TABLA I

Patrón de difracción de polvo del compuesto C₁₅H₁₄O₂SN₂

#	d _{exp.}	d _{calc.}	I/I ₀	h k l
1	9,66	9,72	100	2 0 0
2	5,74	5,79	77	0 2 0
3	5,31	5,31	26	2 0 2
4	5,05	5,08	6	1 2 1
5	4,19	4,17	82	1 2 2
6	4,06	4,08	11	3 2 1
7	3,64	3,65	57	1 3 1
8	3,56	3,57	7	3 2 2
9	3,52	3,54	13	5 1 1
10	3,44	3,45	3	2 3 1
11	3,23	3,22	3	2 2 3
12	3,17	3,17	92	0 0 4
13	3,00	3,01	3	2 0 4
14	2,81	2,81	4	1 3 3
15	2,78	2,78	6	0 2 4
16	2,67	2,67	5	2 2 4

BIBLIOGRAFIA

- Macías A., Otazo E., Beletskaya I.P. Zh. Org. Khim. 18, 905, 1982.
- Rodríguez Y. Tesis para optar por el Grado de Candidato a Doctor, Centro Nacional de Investigaciones Científicas, 1983.

PROXIMAS PUBLICACIONES

Trace organic analysis in environmental, matrices, natural products and biological fluids by Capillary Gas Chromatography

Alberto J. Núñez Sellés



Editorial CENIC
Avenida 25 y calle 158, Cubanacán, Playa
Ciudad de La Habana, Cuba
Apartado Postal 6990