
ATTI ACCADEMIA NAZIONALE DEI LINCEI
CLASSE SCIENZE FISICHE MATEMATICHE NATURALI

RENDICONTI

VINCENZO RIGANTI, STELIO LOCCHI, RENATO CURTI,
BRUNA BOVIO

La struttura della asym- $\alpha\beta$ -naftazina. Nota II

Atti della Accademia Nazionale dei Lincei. Classe di Scienze Fisiche, Matematiche e Naturali. Rendiconti, Serie 8, Vol. 34 (1963), n.3, p. 261–268.

Accademia Nazionale dei Lincei

http://www.bdim.eu/item?id=RLINA_1963_8_34_3_261_0

L'utilizzo e la stampa di questo documento digitale è consentito liberamente per motivi di ricerca e studio. Non è consentito l'utilizzo dello stesso per motivi commerciali. Tutte le copie di questo documento devono riportare questo avvertimento.

*Articolo digitalizzato nel quadro del programma
bdim (Biblioteca Digitale Italiana di Matematica)
SIMAI & UMI*

<http://www.bdim.eu/>

Chimica. — *La struttura della asym- $\alpha\beta$ -naftazina* (*). Nota II di VINCENZO RIGANTI, STELIO LOCCHI, RENATO CURTI e BRUNA BOVIO, presentata (**) dal Socio G. NATTA.

Abbiamo condotto a termine una accurata ricerca con i raggi X sulla struttura cristallina e molecolare dell'asym- $\alpha\beta$ -naftazina, per determinare con buona precisione le dimensioni della molecola e le distanze intermolecolari.

Cercheremo di collegare questa struttura con quella dei termini inferiori della serie, cioè la pirazina [1] e la fenazina [2]; e di altri derivati della serie da noi studiati o in corso di studio [3, 4, 5, 6, 7].

PARTE SPERIMENTALE.

Come nell'analisi della 5,10 diossifenazina [3, 4, 5] anche in questo caso si può raccogliere soltanto una porzione non molto elevata delle riflessioni osservabili teoricamente, come conseguenza della qualità piuttosto scadente dei sottilissimi cristalli ottenibili; per cui la nostra analisi è stata condotta sulle riflessioni della famiglia di piani $h\ 0\ l$, $h\ 1\ l$, $h\ 2\ l$.

Per le caratteristiche cristallografiche (1) e l'impacchettamento delle molecole sul piano ac rimandiamo alla nostra precedente Nota I. Il lato b ha un valore molto piccolo; tenendo conto che sulla proiezione ac non si ha alcuna sovrapposizione delle molecole è stato fatto uso di proiezioni generalizzate per la determinazione del parametro y . Le proiezioni generalizzate furono calcolate usando i fattori di struttura osservati $h\ 1\ l$, ed i segni calcolati supponendo in prima approssimazione la molecola piana. Le coordinate y sono state ottenute dalla relazione:

$$\text{tang } 2\ \pi y_j = S_1(x_j, z_j) / C_1(x_j, z_j)$$

dove S e C sono le proiezioni generalizzate in seno e coseno, mostrate in fig. 1. Queste coordinate, affinate successivamente, hanno confermato che la molecola non si scosta in modo rilevante dalla planarità. Le coordinate x e z erano state precedentemente determinate con i metodi Fourier.

L'affinazione dei parametri di posizione e di temperatura è stata condotta simultaneamente sui tre livelli col metodo dei minimi quadrati, alternandolo sul piano equatoriale con sintesi F_0 — F_c . Con questo metodo di affinazione siamo scesi ad indici di attendibilità $R_{h\ 0\ l} = 0,13$; $R_{h\ 1\ l} = 0,14$;

(*) Lavoro eseguito nell'Istituto di Chimica Generale dell'Università di Pavia.

(**) Nella seduta del 9 marzo 1963.

(1) Ripetiamo qui le costanti della cella elementare: $a = 10,97\ \text{\AA}$; $b = 4,71\ \text{\AA}$; $c = 14,10\ \text{\AA}$; $\beta = 113^\circ 54'$. Gruppo spaziale $P\ 2_1/c$. $z = 2$.

$R_{h_2l} = 0,13$. La proiezione finale della sintesi Fourier con le differenze permetteva già di riconoscere zone di massima densità sulle quali localizzare

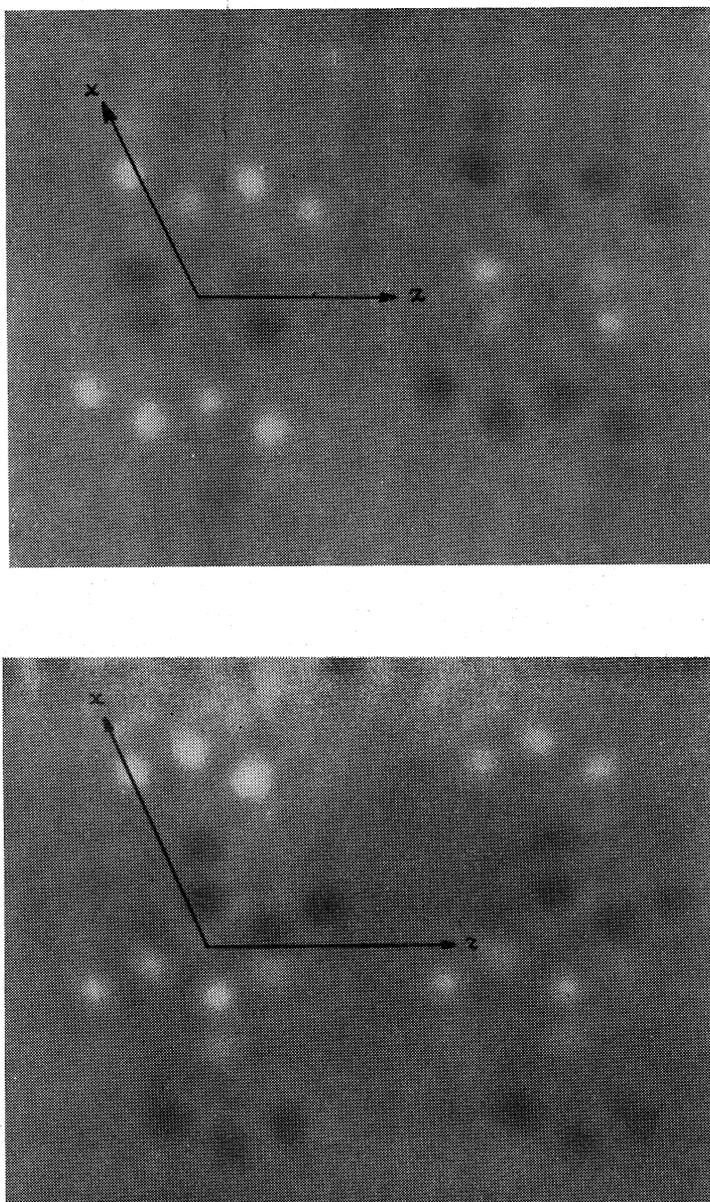


Fig. 1. - Proiezioni generalizzate in coseno e -seno lungo l'asse b , impiegando i fattori h e l .

con buona approssimazione gli atomi di idrogeno, sulle diagonali degli anelli aromatici; la difficoltà di affinazione della coordinata y e del fattore termico ha consigliato tuttavia di omettere il contributo degli atomi di idrogeno nel calcolo della serie definitiva dei fattori F_c .

TABELLA I.

Fattori di struttura osservati e calcolati.

h	k	l	FC	FO	h	k	l	FC	FO	h	k	l	FC	FO	h	k	l	FC	FO	h	k	l	FC	FO	
1	0	0	+50.6	41.7	7	0	4	-3.8	7.0	8	0	8	-4.6	5.0	5	0	14	-0.6	5.0	12	1	1	-0.8	5.0	
2			-18.0	19.6	7			-9.0	7.0	9			-4.2	4.0	6			+5.6	5.0	12			-2.3	6.0	
3			+25.0	23.0	8			-0.6	5.0	9			+1.6	5.0	7			-0.6	5.0	13			-0.4	6.0	
4			-9.8	11.6	8			+8.2	7.9	10			+4.8	5.0	8			-1.6	4.0	0					
5			+11.0	16.5	9			+2.4	5.0	11			-0.6	5.0	0						1	2		+6.5	10.4
6			-29.0	31.2	9			-1.8	6.8	0					0			-1.2	4.0	1			-51.3	40.5	
7			-30.4	31.3	10			-2.8	4.0	0			+12.2	11.0	1			+1.8	4.0	1			-36.4	29.5	
8			-5.0	5.0	10			+21.4	22.1	1			-3.0	5.0	1			-6.8	5.3	2			-21.8	19.0	
9			-8.8	8.3	11			+1.4	4.0	1			+2.2	5.4	2			+4.6	5.2	2			+9.2	10.5	
10			3.4	4.0	11			+38.0	34.5	2			+5.0	5.0	4			+6.8	6.5	3			+17.8	19.1	
11			+6.0	5.0	12			-2.4	5.0	2			+25.2	28.2	4			-3.0	5.4	3			+11.1	9.8	
12			+0.6	5.0	0					3			-2.8	5.0	5			-7.8	9.1	4			-17.0	15.9	
0	0	2	+50.8	47.4	1	0	6	+12.6	11.6	3			+31.8	25.9	6			-5.4	8.1	4			-4.1	5.0	
1			-56.0	50.7	1			-34.6	32.6	4			-6.6	5.0	5			-12.2	12.6	5			+2.6	5.2	
1			+83.8	68.1	2			-41.2	44.9	5			-1.6	5.0	7			-9.8	8.8	5			+17.9	17.9	
2			+13.8	15.4	2			-10.6	7.6	5			-4.8	6.1	1			-3.2	1.8	6			-1.4	5.0	
2			-0.6	4.4	3			+3.0	5.0	6			-5.6	5.0	2			-94.3	65.3	7			+0.4	6.0	
3			+7.2	4.0	3			+16.6	17.2	6			+5.4	7.1	3			-10.2	8.8	7			+7.3	7.0	
3			+34.8	33.0	4			-3.8	5.0	7			+0.8	4.0	4			-20.8	25.1	8			+8.0	10.6	
4			+11.4	14.0	4			-22.4	25.2	7			+2.8	5.0	5			+2.5	5.9	8			+1.5	5.0	
4			-6.9	7.4	5			+1.6	5.0	8			+0.8	5.0	6			-6.5	6.8	9			-1.0	5.0	
5			-5.4	6.3	5			-51.6	52.7	9			-20.0	15.5	7			+5.5	7.7	10			-9.9	8.2	
5			+0.5	4.0	6			-9.4	9.0	10			-3.0	5.0	8			+12.7	12.4	10			+1.9	5.0	
6			-27.4	28.0	6			-2.2	5.0	11			+10.0	8.7	9			+2.0	6.0	11			-3.8	6.0	
6			-1.0	5.0	7			-4.8	5.0	12			+0.0	5.0	10			-4.4	6.0	12			+0.6	6.0	
7			+4.2	5.4	7			+0.8	5.0	0			+5.2	5.3	10			-1.3	6.0	11			+6.5	6.1	
7			-11.2	12.3	8			+31.6	30.8	1			+0.0	5.0	12						13			-0.9	5.0
8			+10.4	8.7	8			+0.2	5.0	1			+0.8	5.0	0			-15.5	12.8	13			+6.5	6.1	
8			+0.6	5.0	9			+15.2	15.6	2			+3.4	5.0	0			+63.9	44.8						
8			-5.0	9.0	9			-7.0	10.1	2			+0.1	4.0	1			-3.8	6.0						
9			-7.0	6.3	10			+2.6	4.0	3			-16.6	12.9	1			+79.3	62.2	0			+1.2	3.6	
9			-4.0	5.0	10			-10.2	5.7	3			+54.8	48.9	2			+44.8	40.8	1			+20.0	18.9	
10			+4.8	5.0	11			+27.2	30.7	4			-12.6	12.0	2			-2.9	6.6	2			+5.7	5.2	
10			-2.4	4.0	12			+20.6	19.8	4			+25.8	22.8	3			+31.0	32.7	2			-0.5	5.0	
11			-0.6	4.0	0			-9.4	9.5	5			-2.0	4.0	4			-25.0	22.7	3			-10.5	8.9	
11			-12.4	9.4	0			-22.4	25.8	6			-6.8	5.0	4			-4.0	4.5	4			-12.7	13.0	
12			-5.4	4.0	1			-17.4	16.5	6			+4.6	4.0	3			-4.0	4.5	4			+6.2	6.6	
0	0	4	+14.6	18.3	2			-5.8	5.3	7			-4.8	5.0	5			-12.2	15.2	4			-9.1	13.6	
1			+26.2	29.6	2			-9.4	9.4	8			+2.0	5.0	6			+7.2	8.7	5			+3.8	5.0	
2			-19.6	19.6	3			-20.0	20.0	9			-8.2	11.0	6			-9.8	9.0	5			-11.6	11.2	
2			-14.8	17.5	3			-0.8	4.0	10			-17.6	16.4	7			-0.1	6.0	6			+2.5	5.0	
2			-36.8	38.4	4			-5.6	5.0	0			+0.2	5.0	8			-5.3	5.0	6			-5.5	5.0	
3			-7.6	5.7	4			+7.8	11.1	0			+0.2	5.0	7			-15.9	15.8	7			-4.5	5.0	
3			-19.2	20.4	5			+6.4	5.0	1			+4.0	5.0	8			-7.5	9.2	7			-8.6	7.5	
3			+3.8	5.0	5			-1.0	4.0	1			+5.2	5.0	9			-1.8	5.0	8			+4.7	5.3	
4			-46.4	47.3	5			-5.0	2.0	2			-4.6	5.0	10			-6.4	6.0	9			-6.4	6.0	
4			-2.8	5.0	6			-5.8	5.3	2			-4.8	5.0	10			-1.5	5.0	9			+3.2	5.0	
5			-21.4	17.7	7			+20.6	17.9	3			-8.2	7.0	10			-11.2	8.8	10			-0.8	6.0	
6			+4.6	5.0	7			+7.2	5.3	3			+2.8	5.0	11			-6.3	5.0	10			-2.5	5.0	
6			+6.2	8.8	8			+21.2	19.1	4			+13.4	15.2	11									+6.0	10

h	k	l	FC	FO	h	k	l	FC	FO	h	k	l	FC	FO	h	k	l	FC	FO	h	k	l	FC	FO
11	-	1	-1.1	6.0	0	2	1	+7.5	6.7	1	2	3	-9.2	9.8	1	2	5	+5.6	6.7	2	2	7	+3.3	6.0
11	-	1	-7.1	7.6	1			-3.1	6.6	1			-6.1	6.1	1			+9.5	6.2	2	2	7	+0.7	6.0
15	-	3	-3.0	5.0	1			+2.2	6.0	2			-1.2	6.0	2			+6.3	9.1	3			+6.2	6.0
0	0	1	-4.0	5.0	2			+6.4	9.4	3			-2.9	23.8	0			-31.0	28.2	3			+10.9	15.3
1			-5.8	5.0	3			-32.8	33.1	3			+21.0	19.3	3			-8.4	9.5	4			+18.5	17.8
2			+16.8	20.1	3			+16.1	19.9	4			-5.3	6.6	4			+17.3	14.3	5			-3.7	6.0
2			+17.9	19.3	4			-22.0	23.2	4			+4.0	6.0	4			+1.6	5.0	5			+9.5	9.0
3			+3.4	5.0	5			-0.7	5.0	5			-11.6	10.6	5			+17.8	15.8	6			+2.8	6.0
3			+1.0	5.0	5			+11.0	13.4	6			-5.2	5.0	6			-6.5	7.4	6			+7.1	6.2
4			-2.1	5.0	6			-6.9	6.0	6			-4.9	5.0	6			+4.6	6.0	7			+1.6	6.0
4			+5.0	9.0	6			+6.5	8.9	7			-2.0	6.0	7			-5.6	7.5	7			-12.4	12.9
5			+7.2	8.6	7			-0.8	6.0	8			+0.4	5.0	7			+5.0	6.0	8			+1.9	6.0
6			+7.4	7.8	7			-0.8	6.0	8			-7.4	8.6	7			-24.8	21.3	8			-20.6	18.6
7			-0.5	5.0	8			-7.9	6.0	8			-7.3	8.7	8			-0.3	6.0	9			+1.4	6.0
8			-4.0	5.0	8			-6.8	6.0	9			+3.2	6.0	9			-15.5	14.4	9			-4.3	6.0
9			-4.7	5.0	9			+8.0	6.0	10			-3.7	6.0	9			+1.2	6.0	10			-5.3	6.0
10			-3.2	6.0	9			+7.4	14.0	10			+5.9	6.4	10			-3.2	6.0	11			-1.2	6.0
11			-3.0	6.0	10			+7.4	14.0	10			-1.8	6.0	10			-1.4	6.0	12			-1.2	6.0
12			-2.0	5.0	10			+3.4	6.0	11			-1.8	6.0	10			-2.0	6.0	13			+0.5	6.0
0	1	14	+1.7	5.0	11			+3.4	6.0	11			-3.2	6.0	12			-1.4	6.0	0				
1			-5.1	5.0	12			-1.3	6.0	12			+1.2	6.0	13			+0.9	6.0	0			+2.3	6.0
1			-1.2	5.0	0			+0.9	6.0	13			+2.5	6.0	0					2	8		+6.0	3
2			+0.8	5.0	0			+5.5	8.4	0			+3.4	6.0	0			-13.5	16.4	2			-5.5	6.0
2			-12.8	17.0	1			+11.5	13.4	1			-1.1	6.0	1			-1.4	6.0	2			-12.0	12.5
3			-1.4	5.0	1			-5.1	6.0	1</														

h	k	l	FO	FO	h	k	l	FO	FO	h	k	l	FO	FO	h	k	l	FO	FO	h	k	l	FO	FO	
11-	1	5	-6.6	5.4	1	1	8	+6.5	7.3	4	1	10	-6.4	*5.0	9-	2	11	+2.2	*6.0	7-	2	14	-3.4	*6.0	
12-			+4.0	5.0	1-			-9.5	10.1	4-			+5.2	15.4	10-			+2.4	*6.0	8-			-5.1	*6.0	
13-			+13.6	11.6	2-			+1.6	*5.0	5			-1.1	*6.0	11-			+2.7	*6.0	9-			-5.6	*6.0	
0	1	6	-18.1	21.7	3			-9.0	8.3	5-			+18.1	14.6	12-			+9.0	7.6	10-			-1.6	*6.0	
1			+1.7	*5.0	3-			+15.4	15.8	6			+0.6	*6.0						11-			-3.4	*6.0	
1-			-22.4	21.1	4			-1.3	*5.0	6-			-10.5	6.7	0	2	12	+1.3	*6.0						
2			-11.7	11.9	4-			+1.9	*5.0	7			+1.2	6.0	1-			+19.7	18.9						
2-			+14.9	15.2	5			+9.5	7.2	7-			+6.6	*6.0	1-			-15.4	12.7						
3			+10.2	11.5	5-			+8.9	8.6	8-			+1.2	*6.0	2			+1.2	*6.0						
3-			+23.6	21.7	6			-7.1	5.7	9-			-5.6	*6.0	2-			+3.1	*6.0						
4			+8.1	10.2	6-			+12.0	10.1	10-			+0.4	*6.0	3			+1.3	*6.0						
4-			+1.5	*5.0	7			+0.3	*6.0	11-			-6.3	6.0	3-			-1.2	*6.0						
5			-2.8	*5.0	7-			-5.4	*6.0	12-			+1.3	*5.0	4			+2.8	*6.0						
5-			+7.1	6.1	8			-0.6	*6.0	13-			+7.5	5.2	4-			+3.5	*6.0						
6			+24.7	23.2	8-			+1.4	*6.0	0	1	11	+10.3	11.3	5			-2.8	*6.0						
6-			-5.0	7.2	9			-0.1	*6.0	0			-4.2	*5.0	5-			-5.8	6.7						
7			+10.1	10.3	10			+3.7	6.0	1			-4.2	*5.0	6-			-11.9	10.4						
7-			-14.8	15.9	11-			-8.1	17.8	1-			+19.4	18.6	7-			+14.2	14.2						
8			+3.3	*6.0	12-			-0.7	*6.0	2			-6.0	*5.0	8-			+6.9	*6.0						
8-			+4.9	*6.0	13-			+1.9	*5.0	2-			+2.6	*5.0	9-			-1.0	*6.0						
9			+5.9	*6.0	3			+0.3	*5.0	3			-3.6	*5.0	10-			+4.7	*6.0						
9-			-21.6	19.6	0	1	9	-2.6	*5.0	3-			-7.8	5.4	11-			-1.5	*6.0						
10			-16.8	14.5	1			-4.2	*5.0	4-			-2.0	*5.0	12-			-6.4	6.3						
11-			-0.8	*6.0	1-			-1.6	*5.0	5			-4.8	*6.0	0	2	13	-15.0	13.7						
12-			-8.1	5.1	2			-5.4	*5.0	5-			+29.2	25.2	1			-11.8	13.2						
13-			+6.4	4.5	2-			+4.5	6.2	6			-0.1	*6.0	1-			-3.8	*6.0						
0	1	7	-16.2	17.4	3-			-4.4	6.4	6-			-12.5	11.6	2-			0.0	*6.0						
1			-0.1	*5.0	4			-2.9	6.4	7-			-5.3	*6.0	2-			-0.0	*6.0						
1-			-9.4	13.1	4-			-2.1	*5.0	8-			+2.1	*6.0	3			-4.3	*6.0						
2			-6.2	6.2	5			+11.5	10.3	9-			+2.1	*6.0	3-			+2.4	*6.0						
2-			-4.1	5.5	5-			+8.0	*5.0	10-			+1.4	*6.0	4			-2.3	*6.0						
3			-12.2	14.3	6			+7.7	6.1	11-			-6.7	11.0	4-			+1.4	*6.0						
3-			-31.4	30.0	6-			+0.4	*5.0	12-			-5.2	*5.0	5-			+2.9	*6.0						
4			-10.1	12.0	7			-11.5	9.0	13-			-3.7	*5.0	6-			+6.9	6.9						
4-			-11.9	12.2	7-			0.0	*5.0	0	1	12	-0.6	*5.0	7-			+7.4	6.8						
5			+9.2	8.6	8			-1.0	*5.0	1			-11.8	9.1	8-			+4.5	*6.0						
5-			+6.5	7.7	8-			+2.2	*6.0	1-			-24.7	23.6	9-			+2.5	*6.0						
6			+18.6	19.7	9			+5.5	*5.0	1-			-9.5	*6.0	10-			+0.5	*6.0						
6-			+3.0	*5.0	10-			+4.0	*5.0	2			-8.8	9.8	11-			-3.9	*6.0						
7			+2.2	*5.0	11-			-3.7	*6.0	2-			+0.1	*6.0	12-			+2.5	*6.0						
7-			-3.2	*5.0	12-			-10.1	9.0	3			+5.1	*6.0	0	2	14	+14.2	13.8						
8			-5.6	*6.0	13-			+1.2	*5.0	3-			-3.4	*6.0	1			+3.2	*6.0						
8-			-9.4	7.8	0	1	10	+0.1	*5.0	4			-3.5	*6.0	1-			+1.7	*6.0						
9			+8.6	10.8	0			-2.9	5.1	5			+5.2	*6.0	2			-3.1	*6.0						
10			+12.4	7.8	1			-2.0	*5.0	5-			+24.2	24.2	3-			+1.9	*6.0						
11-			+3.9	*6.0	1-			-9.4	7.0	6-			+9.4	11.9	2-			+2.9	*6.0						
12-			+3.7	*5.0	2			-10.1	6.5	7-			+4.2	6.0	4-			-3.9	*6.0						
13-			+1.7	*5.0	2-			+15.1	14.3	8-			+14.5	12.3	5-			+2.2	*6.0						
0	1	8	+3.3	*5.0	3			-1.0	*5.0	9-			-0.7	*6.0	6-			-2.3	*6.0						
					3-			+2.1	5.0	10-			+2.2	*6.0											

Il segno * indica le riflessioni non osservate; il valore numerico indica il minimo valore osservabile nella corrispondente regione dello spazio reciproco.

I valori degli indici di attendibilità sono stati calcolati su tutte le riflessioni osservate, ad eccezione di quelle indicate con ° nell'elenco dei fattori di struttura, che sono evidentemente affette da estinzione. I valori dei fattori di struttura osservati e calcolati sono elencati nella Tabella I, e le proiezioni della struttura sui piani *ab* e *bc* sono date nelle figg. 2 e 3.

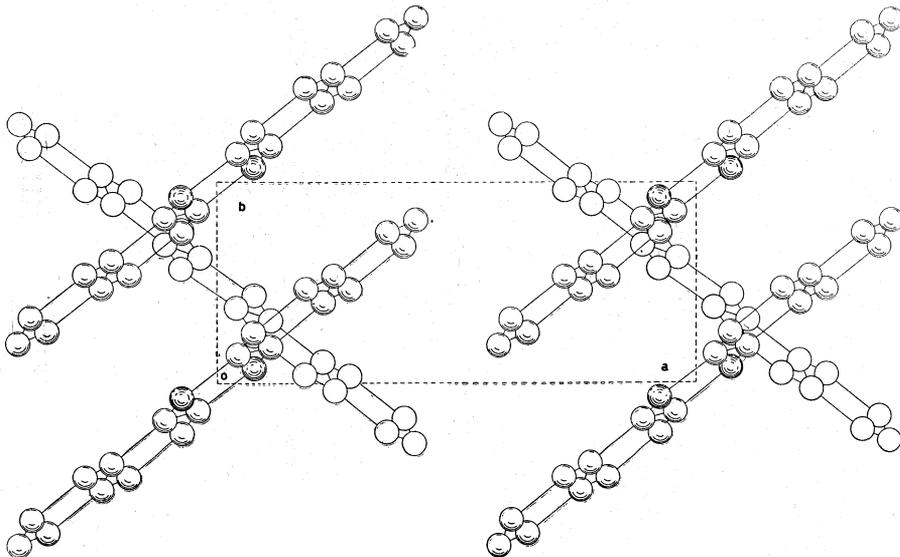
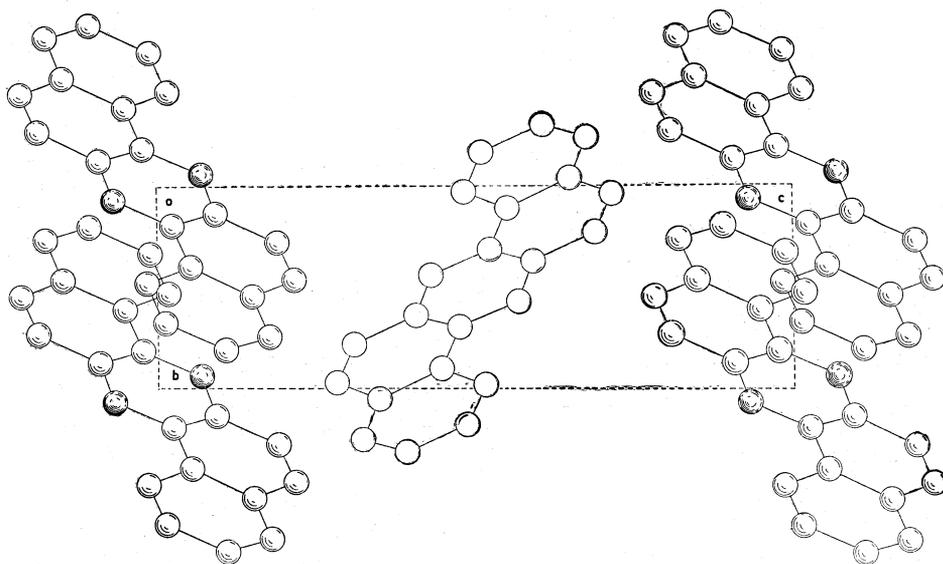


Fig. 2. - Proiezione della struttura sul piano *ab*.

Fig. 3. - Proiezione della struttura sul piano bc .

COORDINATE, ORIENTAZIONE E DIMENSIONI MOLECOLARI.

Nella Tabella II sono riportate le posizioni finali ed i parametri di temperatura, nonché le deviazioni Δ dal miglior piano; x , y e z sono dati come frazioni di lato della cella unitaria riferita agli assi monoclinali, e X' , Y e Z' sono dati come coordinate in \AA riferite agli assi ortogonali a' , b e c dove a' è perpendicolare sia a b che a c . L'equazione del piano molecolare medio della molecola col centro di simmetria in 000 è:

$$0,679 X' - 0,723 Y + 0,140 Z' = 0.$$

TABELLA II.

Parametri finali di posizione e di temperatura, e deviazioni dal piano medio.

Atomo	x	y	z	X' $\pm 0,010$	Y $\pm 0,008$	Z' $\pm 0,011$	B	Δ	
C	1	0,0401	0,1300	0,0941	0,4022	0,6123	1,1486	1,70	- 0,009
	2	0,0838	0,2692	0,1916	0,8405	1,2679	2,3292	1,85	- 0,020
	3	0,1855	0,4571	0,2206	1,8604	2,1529	2,2861	2,10	+ 0,027
	4	0,2460	0,5405	0,1521	2,4675	2,5458	1,0513	2,10	- 0,018
	5	0,3492	0,7428	0,1793	3,5022	3,4986	0,9761	2,30	- 0,015
	6	0,4082	0,8071	0,1099	4,0940	3,8014	-0,2646	2,30	- 0,006
	7	0,3685	0,6753	0,0131	3,6958	3,1807	-1,4530	2,30	+ 0,006
	8	0,2672	0,4774	-0,0157	2,6839	2,2486	-1,4107	2,10	- 0,001
	9	0,2062	0,3940	0,0534	2,0680	1,8557	-0,1635	1,85	+ 0,039
	10	0,0991	0,1925	0,0232	0,9939	0,9067	-0,1133	1,70	+ 0,004
N	0,0565	0,0656	-0,0700	0,5667	0,3090	-1,2381	1,55	- 0,012	

Si possono calcolare dalle coordinate della Tabella II le lunghezze di legame e gli angoli di valenza indicati nella fig. 4.

L'errore medio delle distanze interatomiche può essere valutato in 0,024 Å.

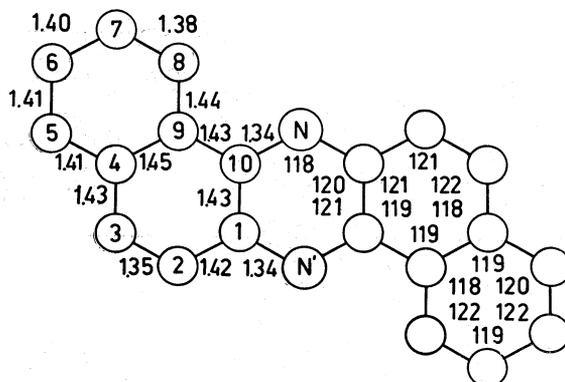


Fig. 4. - Angoli di valenza e distanze di legame.

DISCUSSIONE.

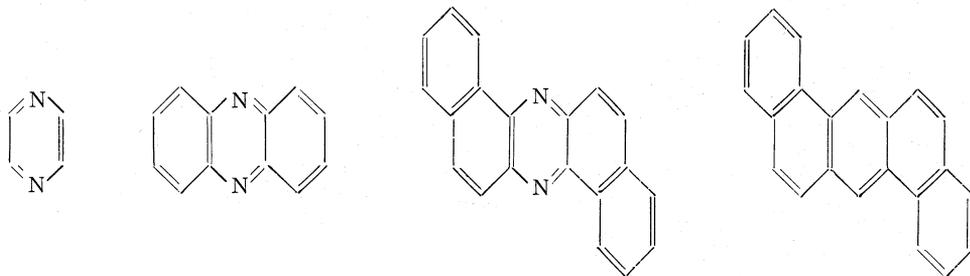
L'analisi strutturale rivela una interessante analogia con la struttura della fenazina [2]; ma dalle distanze intermolecolari appare un impacchettamento più compatto delle molecole di asym- $\alpha\beta$ -naftazina nel cristallo (che dovrebbe essere parzialmente responsabile dell'osservato aumento di densità di circa il 4%) reso possibile dalla diversa inclinazione della molecola.

Per tutti i tre termini della serie: pirazina, fenazina, asym- $\alpha\beta$ -naftazina (Tabella I) l'angolo C- \widehat{N} -C si mantiene inferiore a 120°, in accordo con l'osservazione di Hameka e Liquori [8] secondo cui negli anelli eterociclici contenenti atomi di azoto l'angolo di valenza dell'azoto è minore di 120°; tale angolo è però crescente, nell'ordine.

TABELLA III.

SOSTANZA	D _{sper.}	$\overline{C-C}$	$\overline{C-N}$	C- \widehat{N} -C
Pirazina	1,266	1,378	1,334	115,1°
Fenazina	1,34	1,402	1,345	116,6°
Asym- $\alpha\beta$ -naftazina	1,40	1,41 ₄	1,34 ₂	118°
1,2,5,6 dibenzantracene (monoclino) .	1,282	1,408	—	—

Analoga variazione subisce la distanza media C—C, mentre la distanza C—N non sembra subire variazioni significative. La distanza media C—C nella asym- $\alpha\beta$ -naftazina concorda (nel limite dell'errore sperimentale) con quella determinata da Robertson e White [9] nel corrispondente composto omociclico 1, 2, 5, 6 dibenzantracene. Le distanze C_4 — C_9 e C_2 — C_3 sono rispettivamente la più lunga e la più corta distanza C—C in entrambi i casi (vedi fig. 4).



Anche la molecola di asym- $\alpha\beta$ -naftazina, come le altre già da noi studiate (loc. cit.), può ritenersi planare entro i limiti dell'errore sperimentale; la deviazione massima dal piano molecolare medio essendo 0,039 Å e la deviazione quadratica media essendo 0,018 Å. Le distanze intermolecolari corrispondono alle normali interazioni di van der Waals, e le più significative sono date in Tabella IV.

TABELLA IV.

Distanze intermolecolari.

Atomo	X (Å)	Y (Å)	Z (Å)	Atomo	X (Å)	Y (Å)	Z (Å)	Distanza (Å)
N	10,3502	0,3090	0,9870	C	10,0507	3,6229	4,3484	5,26
C	3,8307	3,4986	2,5281	C	6,4929	6,1564	5,5004	4,07
C	4,4780	3,8014	1,5496	C	7,1393	5,8545	4,5219	3,70
C	2,0349	2,1529	3,1105	C	2,9356	0,1064	6,8286	4,01
C	0,9193	1,2679	2,7016	N	0,6198	2,0460	6,0630	3,58
C	3,8307	3,4986	2,5281	C	7,1393	5,8545	4,5219	3,89
C	4,4780	3,8014	1,5496	C	8,2714	4,9036	4,9054	4,07
C	4,0424	3,1807	0,1847	C	1,0871	5,6167	0,3271	3,88

Le distanze date nell'ultima colonna si intendono tra gli atomi le cui coordinate - in Å riferiti alla cella monoclinale - sono riportate nella stessa riga.

I calcoli riguardanti la presente struttura furono eseguiti presso il Centro di Calcolo Elettronico dell'Università di Pavia, e presso l'Institut für Angewandte Mathematik dell'Università di Berna, che ringraziamo per la collaborazione. Le curve di scattering sono state calcolate secondo Forsyth e Wells [10].

BIBLIOGRAFIA.

- [1] P. J. WHEATLEY, « Acta Cryst. », 10, 182 (1957).
- [2] F. H. HERBSTEIN, G. M. J. SCHMIDT, « Acta Cryst. », 8, 399 (1955).
- [3] R. CURTI, V. RIGANTI, « Acta Cryst. », 13, 55 (1960).
- [4] R. CURTI, V. RIGANTI, « Rend. Ist. Lomb. Sc. e Lett. », A 94, 129 (1960).
- [5] V. RIGANTI, R. CURTI, A. CODA, « La Ric. Sc. », 30, 1570 (1960).
- [6] R. CURTI, V. RIGANTI, S. LOCCHI, « Acta Cryst. », 14, 133 (1961).
- [7] B. BOVIO, R. CURTI, S. LOCCHI, V. RIGANTI, questi « Rend. », XXXII, 353 (1962).
- [8] H. F. HAMEKA, A. M. LIQUORI, « K. Ned. Akad. Wet. », B 59, 242 (1956).
- [9] J. M. ROBERTSON, J. G. WHITE, « J. Chem. Soc. », 1956, 925.
- [10] J. B. FORSYTH, M. WELLS, « Acta Cryst. », 12, 277 (1959).