
ATTI ACCADEMIA NAZIONALE DEI LINCEI
CLASSE SCIENZE FISICHE MATEMATICHE NATURALI
RENDICONTI

GLORIA CIALDI, CESARE SABELLI

**La struttura del
2-Metil-3-fenil-4-bromoisossazolin-5-one**

*Atti della Accademia Nazionale dei Lincei. Classe di Scienze Fisiche,
Matematiche e Naturali. Rendiconti, Serie 8, Vol. 42 (1967), n.4, p. 538–553.*

Accademia Nazionale dei Lincei

<http://www.bdim.eu/item?id=RLINA_1967_8_42_4_538_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/>

Cristallografia. — *La struttura del 2-Metil-3-fenil-4-bromoisossazolin-5-one* (*). Nota di GLORIA CIALDI e CESARE SABELLI, presentata(**) dal Socio G. CAROBBI.

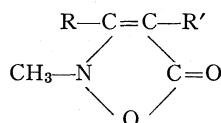
SUMMARY.—The crystal structure of 2-Methyl-3-phenyl-4-bromoisoxazolin-5-one has been determined from three-dimensional X-ray diffraction data. The crystals have the composition $C_{10}H_8O_2NBr$ and are monoclinic, space group $P 2_1/n$. There are 4 molecules in the unit cell, which has dimensions:

$$a = 7.551 \pm 0.001 \quad b = 18.310 \pm 0.009 \quad c = 7.626 \pm 0.005 \text{ \AA} \quad \beta = 100.85 \pm 0.07^\circ.$$

The position of the bromine atom was found by a three-dimensional Patterson function. With the aid of three subsequent three-dimensional Fourier summations all the remaining non-hydrogen atoms were located. An isotropic least-squares refinement was carried out for two cycles. The final R value is 0.147.

The isoxazoline ring makes an angle of about 50° with the phenyl group; both rings are essentially planar. The adjacent molecules are held together only by van der Waals forces. All intermolecular distances of less than 4 Å were calculated. The shortest distance is 3.12 Å.

Ricerche condotte [1] sulla serie dei 2-metilisossazolin-5-oni, metil e aril sostituiti nelle posizioni 3 e 4, hanno fatto notare che i composti



con l'arile in 3 ($R = C_6H_5$) sono, in alcune proprietà fisiche, nettamente differenti da quelli con l'arile in 4 ($R' = Ar$). La banda di assorbimento IR relativa alla $\nu_{C=O}$, che nei 3-aril composti ($R = C_6H_5$, $R' = H, CH_3, Br$) allo stato solido compare fra 1730 e 1750 cm^{-1} , si trova sotto 1706 cm^{-1} per i composti 4-arilici ($R = H$, $R' = p\text{-Br}-C_6H_4$; $R = H, CH_3$, $R' = C_6H_5$). Inoltre la maggiore solubilità in etere ed il più basso p.f. dei 3-aril composti rispetto agli isomeri 4-aril sostituiti, farebbero supporre una differenza nella polarità delle molecole appartenenti alle due serie di composti.

Le misure di momento elettrico, effettuate su soluzioni benzeniche, hanno fornito tuttavia dati omogenei per tutti i 2-metilisossazolin-5-oni (da 5,4 a 6,2 D); ed anche gli spettri IR, eseguiti in soluzione, non mostrano differenze marcate nella posizione della $\nu_{C=O}$ (sempre compresa fra 1742 e 1760 cm^{-1} , solvente CCl_4). Le anomalie prima osservate sembrerebbero quindi imputa-

(*) Lavoro eseguito presso la Sezione di Firenze del Centro Nazionale di Cristallografia del C.N.R., Istituto di Mineralogia dell'Università

(**) Nella seduta dell'8 aprile 1967.

bili ad una diversità di struttura cristallina fra i composti 3-aril e gli isomeri 4-aril sostituiti.

La presente indagine strutturale sul 2-metil-3-fenil-4-bromoisossazolin-5-one ($R = C_6H_5$, $R' = Br$) intende portare un contributo alla soluzione di questo problema.

PARTE SPERIMENTALE.

Una certa quantità di sostanza, gentilmente fornita dal Dott. De Sarlo, dell'Istituto di Chimica Organica dell'Università di Firenze, è stata disciolta in etere etilico e quindi ricristallizzata per ottenere cristalli adatti per le riprese ai raggi X.

La densità, misurata con il metodo della flottazione in una soluzione acquosa di iodomercurato potassico e di iodomercurato di bario, è di $1,61 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$ e il valore calcolato in base a 4 molecole di $C_{10}H_8O_2NBr$ per cella è di $1,63 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$.

I cristalli, tabulari secondo $\{010\}$, presentano all'osservazione microscopica simmetria monoclinica. Dall'esame delle estinzioni sistematiche il composto risulta appartenere al gruppo spaziale $P2_1/n$.

Per la determinazione delle costanti reticolari si sono effettuate due riprese, con un apparecchio di Weissenberg, per le stratolinee $h0l$ ed $hk0$ (radiazione $CuK\alpha$). Su questi due fotogrammi è stato registrato quale standard uno spettro di polvere di argento, secondo il metodo indicato da Christ [2]. I valori dei parametri della cella elementare, misurati utilizzando le diffrazioni del tipo $h00$, $0k0$ e $00l$, sono stati raffinati per mezzo di un calcolo dei minimi quadrati. Questo è stato eseguito su di un gruppo di 65 riflessi, tutti con un θ maggiore di 40° , dopo aver apportato ai loro d le opportune correzioni in base alle differenze fra i θ registrati per le righe dell'argento e quelli teorici. I risultati ottenuti sono:

$$\begin{aligned} a &= 7,551 \pm 0,001 & b &= 18,310 \pm 0,009 & c &= 7,626 \pm 0,005 \text{ \AA} \\ \beta &= 100,85 \pm 0,07^\circ. \end{aligned}$$

Per l'indagine strutturale sono stati raccolti i dati tridimensionali relativi a 5 stratolinee, da $hk0$ a $hk4$ (radiazione $CuK\alpha$ filtrata con Ni), per un totale di 1433 riflessi indipendenti dei quali 419 con intensità troppo bassa per essere registrata. Alle intensità integrate, misurate per mezzo di un microdensitometro, sono state apportate le correzioni per l'allungamento delle macchie e per il fattore di Lorentz-polarizzazione.

DETERMINAZIONE DELLA STRUTTURA.

L'interpretazione della funzione di Patterson, calcolata con gli F^2 dei cinque livelli Weissenberg messi in scala in base ai tempi di posa, ha permesso di ottenere con sicurezza la posizione del solo atomo di Br. Con le coordinate del bromo, che rappresenta circa un terzo del numero totale di elettroni nella

cella, è stato eseguito un calcolo di fattori di struttura; attribuendo i segni così ottenuti agli F osservati e sottraendo a questi il contributo portato dall'atomo di Br, è stata eseguita una Fourier tridimensionale. In base a questa sintesi delle differenze è stato possibile individuare l'anello dell'isossazolina e l'ossigeno della funzione chetonica. Dal calcolo dei fattori di struttura l'indice R di discrepanza risulta ora del 32 %, mentre era del 40 % con il solo atomo di bromo. Una successiva Fourier degli osservati ha consentito di localizzare l'anello del fenile, mentre la posizione del carbonio del gruppo metilico è stata determinata per mezzo di una ulteriore più dettagliata sintesi. L'indice R ottenuto con il contributo di tutti gli atomi, idrogeni esclusi, è sceso al 17,4 %.

Un affinamento preliminare della struttura, eseguito con il metodo dei minimi quadrati programmato per l'elaboratore I.B.M. 1620, ha portato il valore dell'indice R al 14,7 %.

TABELLA I.

Coordinate atomiche in frazioni dei lati della cella e fattori termici isotropi in Å².

Atomo	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>	B	Atomo	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>	B
Br	0,3275	0,6170	0,3460	4,56	C ₄	0,9354	0,7131	0,1280	4,20
O ₁	0,3019	0,4405	0,2528	3,62	C ₅	0,8379	0,6507	0,1170	3,43
O ₂	0,5797	0,4435	0,1861	3,22	C ₆	0,7638	0,6274	0,2628	2,95
N	0,7100	0,4989	0,1807	3,47	C ₇	0,6542	0,5614	0,2463	2,45
C ₁	0,7932	0,6669	0,4246	4,09	C ₈	0,4892	0,5489	0,2877	2,58
C ₂	0,9010	0,7304	0,4384	5,46	C ₉	0,4344	0,4755	0,2485	2,92
C ₃	0,9682	0,7539	0,2840	4,02	C ₁₀	0,8898	0,4674	0,2271	3,60

In Tabella I vengono riportate le coordinate degli atomi ed i fattori termici isotropi ottenuti con due cicli di affinamento. I fattori di struttura osservati e calcolati sono elencati in Tabella II.

Per il calcolo dei fattori di struttura sono stati usati i fattori atomici di diffusione di Cromer e Waber [3].

DESCRIZIONE DELLA STRUTTURA.

La struttura consiste in molecole discrete disposte obliquamente nel piano (001), con gli anelli dell'isossazolina quasi paralleli a tale piano e pressoché equidistanti dai centri di simmetria. Notevolmente inclinati rispetto a questa orientazione sono invece gli anelli del fenile, i cui vertici estremi si trovano a ridosso degli slittopiani (fig. 1).

TABELLA II.
Fattori di struttura osservati e calcolati.

<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	F _o	F _c	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	F _o	F _c	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	F _o	F _c
0	2	0	56,1	78,8	3	1	0	64,2	-69,2	5	15	0		2,2
	4		40,8	-51,6		2		24,5	-19,8		16			-5,2
	6		38,7	-38,2		3		24,7	26,2		17		12,3	13,0
	8		65,5	65,8		4		29,7	-30,4		18		6,0	7,0
	10		23,8	-16,8		5		66,3	73,6		19		5,7	4,0
	12		54,5	-56,4		6		7,4	-6,4	6	0	0	36,9	33,4
	14		16,8	-19,2		7		10,7	-11,0		1		17,5	-14,4
	16		37,1	35,4		8		30,2	-22,2		2			3,6
	18		31,9	32,0		9		61,3	-61,0		3		9,8	-4,4
	20			-5,0		10		16,2	18,0		4		43,4	-41,2
	22		12,5	-13,2		11			1,4		5			4,6
1	1	0	72,7	103,8		12		15,1	12,0		6		13,0	-10,8
	2		27,9	-34,4		13		30,9	33,4		7		9,9	5,8
	3		33,4	38,8		14		15,2	12,4		8		23,4	20,6
	4		39,2	-34,4		15		18,3	-17,0		9			-5,8
	5		57,7	-63,6		16			5,8		10			5,0
	6		69,8	85,2		17		29,1	-31,2		11		7,9	-4,2
	7			1,2		18			-0,8		12		12,5	-10,8
	8		37,7	36,8		19		6,7	-6,2		13			-0,2
	9		8,6	2,2		20			1,6		14			-9,2
	10		53,0	-58,0		21		13,6	12,6		15		6,5	6,0
	11		13,8	-12,6	4	0	0	22,4	-23,2		16		10,5	10,2
	12		49,1	-47,4		1		31,9	30,8		17		4,7	1,0
	13		30,7	-28,6		2		4,9	-3,8		18			9,6
	14		27,0	27,0		3		49,1	47,6	7	1	0		-0,8
	15		12,9	9,8		4		23,2	20,8		2		25,2	-21,4
	16		20,5	21,0		5		73,1	-75,2		3		17,1	-15,4
	17		26,0	26,0		6		13,0	10,6		4			0,6
	18		8,5	-8,2		7		45,0	-42,6		5			-8,4
	19			6,0		8		7,4	-6,6		6		31,2	28,4
	20		7,4	-7,0		9		27,5	28,2		7			-3,2
	21			-2,8		10			-4,2		8		15,5	14,2
	22			5,4		11		49,5	50,6		9			3,6
2	0	0	58,6	-70,2		12		12,7	13,0		10		19,9	-19,2
	1		89,2	-110,2		13		16,4	15,6		11		6,8	-4,2
	2		27,1	-25,8		14			4,6		12		10,5	-9,4
	3		22,1	-29,2		15		13,6	-12,0		13		5,8	-5,8
	4		96,7	102,6		16			1,4		14		12,0	9,2
	5		63,4	64,4		17			-0,2		15			-1,0
	6		22,1	-18,6		18			-3,4		8	0	22,8	-19,4
	7		78,1	81,2		19		8,6	9,6		1			-7,8
	8		48,4	-47,4		20		7,3	4,0		2		5,7	-2,6
	9		27,0	-19,8		5	1	0	42,9	40,0	3		8,5	-7,4
	10		27,5	-25,8		2		36,4	36,6		4		12,1	8,6
	11		31,4	-34,8		3			-1,2		5		7,8	5,8
	12		11,2	11,2		4		7,3	-3,6		6			1,6
	13		12,8	9,8		5		23,9	-17,0		7		7,5	9,4
	14			0,8		6		38,2	-37,8		8			-7,2
	15		29,2	27,2		7			2,6		9		8,6	-6,8
	16		20,1	-20,4		8		15,4	-14,4		10			-5,2
	17		7,6	7,2		9		30,2	28,8		11		9,8	-8,4
	18		15,4	-16,0		10		37,6	36,6		12		3,9	3,4
	19		13,9	-14,0		11			-9,0	9	1	0	14,1	-10,6
	20		6,2	7,0		12		22,7	25,2		2		7,9	4,2
	21			-4,2		13		17,1	-14,8		3		7,4	5,2
	22			4,8		14		12,2	-9,0		4			2,4

Segue: TABELLA II.

<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	<i>F_o</i>	<i>F_c</i>	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	<i>F_o</i>	<i>F_c</i>	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	<i>F_o</i>	<i>F_c</i>
9	5	0	13,1	9,6	1	9	I	11,5	-13,4	2	22	I		-0,8
	6		7,9	-6,4		10		12,6	-11,4	3	22	-I	8,3	8,8
	7			-3,4		11		58,0	-61,4		21			-2,8
0	1	I	39,0	35,8		12		18,7	16,2		20			-1,0
	2		108,2	-129,0		13		13,4	12,4		19		11,8	-13,4
	3		53,4	-58,2		14		23,0	22,2		18		12,6	-10,2
	4		48,2	46,2		15		28,8	31,8		17			-3,2
	5		53,6	-57,2		16		8,9	-10,2		16		9,5	-11,2
	6		108,7	122,8		17			5,4		15		21,0	18,2
	7		18,7	17,6		18			-7,2		14		19,6	13,8
	8		40,5	44,4		19		11,4	-12,0		13			-5,4
	9		33,0	38,0		20		6,3	6,2		12		31,7	30,4
	10		50,9	-51,0		21			-1,2		11		46,3	-44,8
	11			-7,2		22			5,8		10		9,0	8,4
	12		12,7	-16,0		23		5,4	7,0		9		18,4	-11,2
	13		28,0	-29,6	2	23	-I		-1,6		8		11,4	-12,0
	14		30,5	31,0		22		7,5	8,2		7		46,8	53,4
	15		10,5	-8,8		21		7,2	-4,8		6		55,0	52,4
	16		19,6	19,4		20		8,1	-9,2		5		38,3	35,4
	17		18,7	20,0		19		7,6	-4,0		4		47,1	48,0
	18		10,2	-9,4		18		21,5	-22,4		3		31,0	-32,6
	19			-2,2		17			-3,2		2		6,0	2,0
	20		12,0	-13,2		16		22,7	20,8		1		44,3	-44,4
	21		8,6	-9,6		15			-9,2		0		71,4	-73,6
	22		6,8	6,8		14		20,4	18,4	3	0	I	12,2	-13,2
	23			-1,0		13		17,9	-19,0		1		42,3	46,6
I	23	-I		1,6		12		35,9	-35,6		2		6,3	-7,8
	22		10,1	-12,6		11		16,1	-12,6		3		37,0	41,0
	21		6,1	-5,4		10		57,8	-63,4		4		56,9	57,8
	20		9,9	-9,2		9		35,9	35,4		5			-5,8
	19			-1,4		8		19,7	19,2		6		24,6	-20,0
	18		11,7	13,6		7		35,3	31,6		7		59,4	-68,0
	17			-5,4		6		87,7	99,4		8		50,9	-56,2
	16		11,1	12,8		5		14,2	-12,2		9		21,7	21,2
	15			-3,4		4			-3,2		10		25,8	-25,6
	14		29,5	-31,4		3		20,6	-19,6		11		40,9	42,2
	13			3,2		2		92,9	-111,0		12		11,6	11,4
	12		52,6	-53,0		1		45,5	45,2		13			2,8
	11		9,7	-4,0	2	1	I	82,6	-90,8		14			9,8
	10		39,0	38,4		2		26,2	21,8		15		26,4	-27,2
	9		11,4	-10,8		3		77,9	87,4		16			-6,2
	8		46,3	49,8		4		7,2	-5,2		17			5,2
	7		28,0	24,6		5		53,3	60,6		18			0,2
	6		37,7	-40,8		6		23,3	-21,2		19		10,8	14,0
	5			-1,4		7		33,2	-35,4		20			6,6
	4		103,5	-122,6		8		15,3	15,2		21			3,0
	3		17,0	12,4		9		55,5	-60,2	4	21	-I	6,8	7,2
	2		13,3	10,4		10		6,7	6,6		20			1,4
	1		41,4	-45,0		11		22,4	21,4		19			-2,6
	0		38,4	34,0		12			0,8		18			0,2
I	0	I	19,3	13,4		13		43,9	50,2		17		26,0	-25,4
	1		7,2	-13,2		14			0,8		16		10,9	-8,4
	2		4,0	0,8		15		12,8	12,8		15			-3,6
	3		99,9	-110,0		16			7,6		14		11,3	-13,6
	4		36,9	40,0		17		11,6	-12,6		13		31,1	28,4
	5		63,9	69,8		18			3,0		12		14,4	10,6
	6		42,7	46,0		19			2,0		11		21,2	15,4
	7		57,6	65,6		20			0,8		10		12,7	14,4
	8		15,3	-16,8		21		15,7	19,6		9		34,8	-34,6

Segue: TABELLA II.

<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	F _o	F _c	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	F _o	F _c	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	F _o	F _c
4	8	—I		6,2	5	10	I	15,1	13,8	7	2	—I	17,6	16,0
	7		14,9	—10,8		11		9,5	—10,0		I			—0,6
	6			—3,2		12		23,3	—25,2		0		47,8	41,0
	5		74,5	73,6		13			5,2	7	0	I	18,7	—15,2
	4		19,0	12,4		14		9,9	—12,0		I		23,0	—23,8
	3		56,9	53,0		15			2,4		2			—8,0
	2		35,4	31,6		16		14,6	16,6		3		26,5	—28,2
	I		40,5	—46,8		17			3,8		4		17,2	14,8
4	I	I	31,7	33,6		18		7,7	10,0		5			—6,4
	2		43,7	50,0		19			—1,6		6		10,9	7,8
	3		40,2	—40,6	6	18	—I	4,8	2,4		7			4,8
	4			0,0		17		13,2	11,4		8		10,5	—9,4
	5		52,7	—51,8		16		7,2	—7,8		9		8,4	—8,0
	6		36,6	—40,6		15			4,2		10		7,2	—7,0
	7			6,0		14		13,8	—11,8		11		9,9	—9,8
	8		21,5	—27,0		13		23,8	—20,0		12		12,0	16,4
	9			—5,6		12			4,0		13		8,4	9,6
	10		19,9	17,6		11		9,0	—9,8		14		7,5	5,8
	11		13,1	—14,0		10		22,7	16,0		15		9,2	10,2
	12		11,0	11,2		9		15,1	9,2	8	12	—I	12,7	—9,4
	13		18,6	—17,8		8			—0,2		11			0,2
	14		13,3	—13,2		7			—3,4		10		12,4	—10,0
	15			2,6		6		10,1	—5,0		9			4,0
	16		11,5	—10,6		5		36,6	—29,4		8		11,5	10,8
	17		12,8	13,8		4		22,0	23,2		7			2,8
	18		6,7	9,8		3		21,5	—17,2		6		22,4	18,4
	19			4,6		2		37,6	33,2		5			1,2
	20		10,4	13,2		I		36,7	30,4		4			1,6
5	20	—I		1,8	6	I	I		6,6		3			1,0
	19		12,9	10,2		2		41,9	—42,0		2		18,1	—11,0
	18			—3,8		3			1,2		I			2,8
	17			—3,8		4		20,4	—19,8	8	I	I	10,2	—9,4
	16			—8,6		5			—4,0		2			0,4
	15		23,5	—20,4		6		17,7	17,6		3		8,6	8,4
	14			3,6		7		9,9	7,8		4		7,8	—10,8
	13			—6,8		8			—6,0		5		11,1	11,6
	12			2,2		9		14,3	15,6		6		6,8	—7,4
	11		32,2	26,8		10		14,3	—12,0		7		7,8	—10,0
	10		11,8	—13,8		11			3,6		8			—2,6
	9		13,6	12,2		12		10,1	—8,0		9		12,4	—11,4
	8		25,4	—20,4		13			—7,0		10			1,8
	7		43,1	—34,8		14		10,2	11,6	9	8	—I	11,5	—10,0
	6			0,0		15			—0,6		7		8,9	8,2
	5		26,6	—21,4		16		11,8	10,8		6		6,4	2,8
	4		15,8	13,6		17			3,4		5		9,9	6,6
	3		49,1	45,8	7	16	—I	9,3	7,0		4		17,4	11,2
	2		14,6	12,0		15			—1,6		3		7,5	—7,2
	I		39,1	35,6		14		7,6	—9,4		I			—5,8
	0		18,7	—18,0		13		8,7	—5,0		2			1,8
5	0	I	50,2	52,2		12		20,3	—17,0		0		16,9	—15,6
	I			3,2		11		10,3	—6,8	0	I	2	93,5	—83,0
	2		9,7	—8,2		10			3,0		2		117,2	—103,8
	3			0,2		9			—1,8		3		94,9	—96,0
	4		44,8	—45,2		8		20,7	15,8		4		7,0	—1,6
	5		7,7	—7,0		7		22,4	17,4		5		10,4	13,4
	6		25,7	—26,4		6			—3,2		6		25,5	30,0
	7			2,4		5		19,7	18,8		7		56,2	61,8
	8		38,2	40,6		4		32,4	—26,8		8		9,9	—10,8
	9			6,0		3			6,0		9		25,9	—29,2

Segue: TABELLA II.

<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	F _o	F _c	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	F _o	F _c	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	F _o	F _c
O	10	2	21,4	19,0	2	21	-2		1,4	3	8	-2	20,6	17,2
	11		36,5	-41,8		20		8,4	-10,4		7		8,3	-14,8
	12		28,9	30,6		19		8,1	-10,4		6		90,8	89,6
	13			2,0		18		20,5	25,2		5		21,7	-20,2
	14			8,2		17			1,0		4		10,2	7,4
	15		41,5	46,0		16		34,9	37,4		3		26,7	-23,4
	16		25,3	-24,8		15			-1,4		2		61,9	-56,8
	17			1,8		14		11,1	-11,0		1		46,5	41,6
	18			-9,2		13		8,2	-3,0	3	1	2	24,6	24,6
	19		15,8	-20,6		12		33,9	-34,0		2		69,9	81,4
	20			0,0		11		23,2	-21,6		3		9,9	-11,0
	21			-2,8		10		31,8	35,4		4		22,0	24,0
	22			5,4		9			-3,6		5		25,3	-26,4
	23		4,6	7,2		8		65,4	66,6		6		49,8	-57,4
I	22	-2		-2,8		7		8,8	-3,4		7		15,3	15,2
	21			-7,4		6		33,1	-33,6		8		15,3	-17,6
	20		7,0	9,8		5			6,4		9		23,3	26,4
	19			3,4		4		93,7	-93,2		10		31,9	39,0
	18			-0,2		3		29,0	-23,6		11		8,1	8,6
	17			6,8		2		32,5	34,0		12			5,4
	16		15,9	-20,0		1		38,9	-32,0		13			-1,2
	15			5,6		0		115,4	109,8		14		23,4	-28,0
	14		18,0	-16,0	2	0	2	61,1	-65,6		15		7,6	9,0
	13		24,1	-28,4		1		33,5	37,0		16		11,6	-14,8
	12		15,4	21,4		2		10,1	-8,4		17		12,4	16,4
	11		7,7	3,8		3		23,9	31,4		18		7,0	9,6
	10		46,4	42,8		4		13,9	17,4		19			3,6
	9		61,2	62,8		5		61,7	-69,4		20		4,6	7,0
	8		12,0	-17,4		6		18,3	21,8		21			-3,8
	7		52,7	52,6		7		60,1	-69,4	4	21	-2	4,6	5,8
	6		44,5	-44,6		8			-25,4		20			4,6
	5		50,5	-50,6		9			2,0		19		7,9	-7,6
	4		13,1	-7,4		10			-1,0		18		11,5	-11,6
	3		42,3	-44,4		11		38,2	45,6		17		8,2	-1,6
	2		97,4	81,6		12		10,2	14,0		16		12,2	-15,2
	1		37,0	30,4		13			-2,6		15		7,9	6,8
I	1	2	140,9	-154,0		14		25,6	28,8		14		14,9	10,2
	2		51,0	-52,8		15		20,7	-23,0		13			-8,6
	3		19,1	18,6		16		9,1	-9,8		12		20,3	20,4
	4		39,5	-38,2		17			-1,4		11		48,3	-51,6
	5		56,3	61,8		18		7,3	-10,0		10		35,5	-29,4
	6		11,0	-3,4		19		9,8	13,2		9		21,8	-16,2
	7		15,4	-17,8		20			2,2		8		57,5	-53,0
	8			3,6		21			0,6		7		42,0	41,0
	9		41,3	-49,8		22			5,0		6		6,0	4,8
	10		7,2	-3,8	3	22	-2		3,0		5		37,8	29,8
	11		27,6	27,4		21		5,4	-6,8		4		40,1	38,8
	12		12,5	14,6		20		10,3	-12,2		3		19,3	-19,4
	13		28,0	33,2		19			7,8		2		6,5	6,6
	14		20,5	23,8		18		7,4	-8,4		1		19,3	-13,2
	15		11,5	-11,0		17		11,3	12,2		0		70,7	-64,4
	16			-1,6		16		7,5	7,0	4	0	2	44,7	49,8
	17		26,6	-33,0		15		14,8	9,6		1		6,3	6,2
	18			-4,0		14		10,0	10,2		2		9,5	12,8
	19		9,9	-12,2		13			-3,0		3		12,1	11,2
	20		6,1	-7,6		12		35,0	-36,0		4		41,2	-47,8
	21		4,4	7,2		11		13,1	-6,2		5		21,6	21,4
	22			-2,8		10		36,5	-38,4		6			-1,2
2	22	-2		-6,0		9		8,9	-9,2		7			2,6

Segue: TABELLA II.

<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	F _o	F _c	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	F _o	F _c	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	F _o	F _c	
4	8	2	25,8	30,2	6	10	—2		0,4	8	12	—2	10,0	—8,0	
	9		8,3	—10,4		9		13,3	11,0		11		4,5	—2,6	
	10		27,7	31,4		8		6,0	5,6		10		6,1	7,8	
	11		16,3	—15,8		7		43,1	—36,2		9			1,4	
	12		15,8	—22,4		6		12,9	16,8		8		13,7	10,4	
	13		9,3	—11,0		5		18,8	—12,8		7		11,9	6,8	
	14		9,3	—14,0		4		7,6	3,0		6		8,5	—9,2	
	15		7,3	—9,2		3		30,6	21,8		5		7,4	7,8	
	16			7,0		2		14,4	9,8		4		16,8	—10,8	
	17			—1,2		1		35,0	27,8		3		16,3	—13,0	
	18		7,9	12,0		0		8,8	4,8		2			3,4	
	19			3,6		6	0	2	22,5	—23,2	1			—2,0	
	20		6,2	—9,0		1		11,2	—11,2		0		19,1	12,4	
5	20	—2	4,2	3,0		2		6,5	—4,4	8	3	2	6,5	7,6	
	19			—4,0		3		15,5	—18,0		4		5,0	7,6	
	18			2,0		4		11,5	11,6		5			—5,0	
	17		12,2	—14,0		5		11,7	13,6		6			4,2	
	16		10,0	—8,6		6		7,6	6,4		7		7,6	—8,8	
	15			1,4		7		14,3	16,6		8			—4,0	
	14			—8,2		8			—7,2		9			4,8	
	13		24,6	21,4		9			1,6	9	8	—2	4,8	3,8	
	12			—4,2		10			—0,2		7			1,8	
	11		9,5	6,4		11		13,8	—18,8		6		17,0	12,8	
	10			3,6		12			1,2		5			—1,6	
	9		25,6	—20,0		13			—0,4		4			1,6	
	8		16,7	—10,0		14		4,3	4,2		3			—1,4	
	7		31,9	—26,0		15		4,9	8,2		2		19,1	—17,6	
	6		10,2	—6,8		16		6,1	—8,6		1			2,0	
	5		44,3	38,6		7	16	—2		0	1	3	32,6	—31,6	
	4		17,8	12,0		15			—5,2		2		47,7	—46,2	
	3		33,1	25,6		14		7,6	—1,2		3		60,5	59,8	
	2		20,5	15,2		13		9,8	—3,6		4		5,8	2,8	
	1		59,2	—51,8		12			—7,0		5		85,1	91,8	
5	1	2		0,6		11			6,2		6		19,9	—16,8	
	2		31,0	—33,6		10		13,6	—1,8		7		27,6	—29,6	
	3		24,5	—26,2		9		23,1	9,2		8			—7,8	
	4			—1,6		8			18,4		9		42,5	—50,6	
	5		20,7	—24,0		7		11,8	—2,2		10		12,2	—16,6	
	6		35,0	39,2		6		32,4	11,6		11		10,4	9,6	
	7		15,7	17,0		5		16,1	—28,0		12		7,4	—4,0	
	8		5,9	7,4		4		10,2	—10,2		13		42,0	48,6	
	9		16,0	18,6		3		13,2	—7,0		14		14,2	—10,6	
	10		30,3	—36,8		2		22,1	—10,6		15			2,8	
	11			—2,2		1		31,9	17,4		16			4,8	
	12		17,6	—20,8		7	1	2	24,4		17		15,3	—19,4	
	13		6,7	—8,4		2		12,7	—12,6		18			0,2	
	14			7,2		3			—0,4		19			2,2	
	15			—2,0		4		18,0	19,0		20			—4,0	
	16			5,0		5			—3,2		21		7,8	12,2	
	17			1,4		6		19,1	21,0		22			1,0	
	18			—5,8		7			—5,8		1	22	—3		2,4
6	18	—2		—3,8		8			—6,0		21			4,6	
	17			—0,4		9			—5,4		20		5,6	1,4	
	16			—2,2		10		11,5	—14,8		19		10,7	15,6	
	15		18,4	—18,4		11			3,8		18			—6,2	
	14			—1,0		12		4,5	7,6		17			4,4	
	13			—1,8		13		8,1	1,8		16		10,4	11,8	
	12		7,3	4,2		8	13	—2	10,2		15		21,1	—26,8	
	11		30,4	28,4					3,6		14			3,8	

Segue: TABELLA II.

<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	F _o	F _c	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	F _o	F _c	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	F _o	F _c
I	13	—3		5,0	2	2	3	46,5	58,6	3	17	3		—1,8
	12		9,8	8,0		3			—2,4		18			5,0
	11		41,1	45,8		4		18,1	17,6		19			2,0
	10			—2,8		5		24,2	—28,4		20		6,7	—10,2
	9		20,6	21,4		6		48,4	—58,6	4	20	—3	5,3	—6,2
	8			—0,4		7			1,2		19			0,0
	7		64,2	—73,0		8		6,8	—10,4		18		8,4	—7,8
	6		16,1	—8,6		9		15,6	16,0		17		7,5	7,6
	5		48,2	—50,0		10		15,7	21,4		16		15,7	16,4
	4		24,2	22,0		11		7,7	—9,2		15		13,1	6,6
	3		59,9	57,0		12		21,8	23,4		14		24,0	25,0
	2		31,4	25,2		13		23,4	—26,8		13			0,0
	1		70,2	53,0		14		15,4	—20,4		12		13,3	—14,0
	0		61,1	—38,2		15			—4,2		11			2,6
I	0	3	37,8	—45,8		16		14,1	—19,4		10		48,9	—48,6
	1		55,3	59,8		17			0,4		9		16,2	19,8
	2		11,4	—9,8		18			5,4		8		22,3	19,0
	3		31,0	38,4		19		6,6	—7,6		7			—9,6
	4		50,4	54,4		20		4,1	9,2		6		45,8	39,6
	5		41,8	—42,4		21		6,2	—7,8		5		10,4	—10,6
	6		13,4	11,8	3	21	—3		—0,8		4		19,5	—17,8
	7		31,9	—39,8		20			—3,6		3		11,3	—6,8
	8		40,3	—48,8		19			—4,4		2		81,9	—74,6
	9		9,9	9,0		18		7,0	11,0		1		12,2	—10,4
	10		26,3	—26,6		17			2,0	4	1	3	17,7	18,8
	11		24,8	32,8		16		14,6	14,0		2		27,6	—34,6
	12		29,9	36,8		15		17,6	19,4		3		8,8	—13,0
	13		12,8	—10,4		14		21,7	—25,2		4		8,5	—9,2
	14		9,2	14,2		13			10,8		5		9,8	—12,2
	15		10,7	—15,6		12		22,6	—19,8		6		16,1	23,4
	16		7,6	—11,2		11		12,1	—12,4		7		24,6	29,0
	17		8,4	—11,0		10			—0,2		8		17,2	21,6
	18		6,6	—6,2		9		9,7	0,8		9		16,4	21,6
	19		8,1	10,6		8		28,9	28,2		10		9,6	—11,6
	20		5,7	7,6		7		16,9	11,6		11		8,7	9,8
	21			1,6		6		25,9	—28,0		12		7,4	—6,8
2	22	—3	7,1	—8,0		5		12,2	—6,8		13		7,5	—9,2
	21		5,1	—9,2		4		77,5	—75,4		14		11,5	14,4
	20			2,4		3		49,8	—43,8		15			—3,2
	19		5,6	5,0		2			2,8		16		7,9	9,8
	18		13,8	14,0		1		4,9	—1,2		17			4,2
	17		18,1	20,8		0		76,3	67,2		18			—8,8
	16			—5,4	3	0	3	53,8	59,8		19			—1,2
	15			2,8		1			—4,2	5	19	—3	4,9	—5,6
	14		17,6	—14,4		2		12,3	—13,6		18		10,4	—11,0
	13		19,4	—18,2		3			1,8		17			2,0
	12		27,5	32,6		4		47,7	—60,6		16			—6,0
	11		17,3	—18,0		5		5,7	—7,4		15		12,3	12,0
	10		50,6	51,4		5		10,5	—13,4		14		17,7	12,8
	9		35,2	37,4		7		12,2	—12,8		13		5,6	—0,8
	8		19,8	—24,2		8		46,8	59,0		12		25,8	25,2
	7		10,2	—4,0		9		10,7	—6,8		11		8,7	—8,0
	6		65,5	—60,4		10		15,6	22,4		10		9,1	—4,6
	5		55,9	—54,6		11		15,7	16,0		9		16,7	—9,0
	4			7,0		12		22,8	—28,6		8			—2,6
	3		81,2	—78,2		13		7,0	—8,4		7		15,6	14,0
	2		44,0	37,6		14		11,4	—15,2		6		21,4	16,4
	1		44,9	35,2		15			—2,2		5		30,8	23,6
2	1	3	14,2	15,0		16			7,8		4		40,8	35,4

Segue: TABELLA II.

<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	F _o	F _c	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	F _o	F _c	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	F _o	F _c
5	3	—3	32,0	—30,2	7	9	—3		2,4	0	17	4		0,6
	2		22,2	—19,2		8			2,4		18		7,2	—10,8
	1		24,9	—18,6		7		26,4	—21,8		19			6,0
	0		48,1	—42,2		6		11,4	—7,8		20			1,8
5	0	3	11,4	—13,6		5		26,7	—23,0		21			4,0
	1		23,4	—27,4		4			3,4	I	21	—4		7,4
	2			3,8		3		19,1	12,0		20		4,1	5,6
	3		22,5	—26,2		2		16,8	—18,2		19			—3,0
	4		27,7	30,2		1		23,2	16,8		18			11,6
	5		8,3	7,6		0		21,1	—18,0		17		18,6	—23,0
	6			8,0	7	3	3	21,2	27,2		16			1,0
	7		24,9	30,6		4			3,4		15			1,0
	8		8,5	—10,4		5			0,4		14		11,8	—15,2
	9		9,8	—11,8		6			5,0		13		20,7	26,8
	10			4,4		7			—3,4		12		16,2	11,8
	11		11,8	—15,4		8			—7,2		11			—2,0
	12		6,0	9,4		9		4,8	7,6		10		8,8	12,6
	13			4,6		10		5,6	—2,4		9		43,9	—46,8
	14			5,6		11			8,6		8		13,9	—9,6
	15		9,4	14,4		12		4,6	—0,2		7		35,6	—32,8
	16			—6,2	8	13	—3		—8,0		6		33,5	—31,6
	17			—3,2		12			4,0		5		40,8	43,2
6	17	—3	14,7	—14,6		11			—3,2		4		30,8	20,6
	16		4,2	—2,2		10		5,8	3,0		3		37,1	28,0
	15		7,2	—6,0		9		12,7	9,8		2		30,2	23,6
	14			—5,8		8			—6,4		1		68,1	—55,2
	13		19,4	19,6		7		7,5	6,8	I	1	4	51,2	51,8
	12		9,5	5,2		6		10,9	—7,8		2		79,7	85,8
	11		19,1	14,4		5		22,0	—17,4		3			0,8
	10			6,8		4			1,4		4		45,4	44,8
	9		19,3	—15,0		3		13,3	—9,8		5		13,2	8,6
	8		12,3	—5,4		2			2,2		6		22,4	—31,6
	7			2,8		1		17,1	11,8		7			—3,0
	6		36,9	—34,2	9	8	—3	10,5	10,4		8		16,1	—20,6
	5		35,3	30,2		7		7,8	4,2		9			3,6
	4			—7,6		6			—2,0		10		27,9	32,0
	3		13,3	7,4		5			1,0		11		9,5	—7,0
	2		22,3	14,4		4		15,6	—9,8		12			3,8
	1		47,1	—40,0		3		5,6	—0,4		13			0,8
6	1	3	14,5	—20,0		2			—1,0		14		27,1	—35,0
	2			—0,4		1		7,0	—3,6		15			1,8
	3		12,2	13,2		0		22,3	17,2		16		16,3	—21,2
	4		7,9	8,8		0	4	12,7	—17,6		17		8,6	10,4
	5		11,5	13,6		1		37,3	34,8		18		11,4	17,8
	6		10,7	11,6		2		40,5	33,4		19			6,6
	7			—5,6		3		57,1	59,4		20		6,6	13,2
	8			1,6		4		54,0	61,4		21			—1,8
	9		14,2	—17,2		5			1,6	2	21	—4		3,2
	10			0,0		6			—4,8		20			—1,6
	11			2,8		7		20,5	—26,8		19		11,7	16,6
	12			—0,6		8		37,6	—44,6		18			—8,6
	13		7,9	13,4		9		22,6	20,0		17			1,0
	14			—1,0		10		29,2	—33,0		16		17,5	—16,2
7	15	—3	8,4	—7,4		11		19,8	24,0		15		11,3	—13,2
	14		5,6	—1,0		12			12,4		14		13,2	—10,6
	13			1,0		13		13,2	—9,8		13			—9,4
	12		5,8	5,2		14		9,0	6,4		12		16,6	11,6
	11		20,3	18,0		15		20,4	—24,8		11		39,1	45,4
	10		10,1	5,8		16			—1,0		10		6,7	—2,2

Segue: TABELLA II.

<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	F _o	F _c	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	F _o	F _c	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	F _o	F _c
2	9	-4	18,2	17,8	3	9	4	23,7	28,4	5	9	-4	13,7	-8,4
	8		6,5	5,4		10		15,1	-21,8		8		18,3	15,8
	7		42,2	-41,2		11		11,8	-15,4		7			-3,8
	6		14,8	16,0		12			-7,8		6		33,6	25,2
	5		34,0	-30,0		13		17,7	-24,6		5			-5,4
	4		27,1	20,4		14		7,6	13,2		4		9,9	-8,2
	3		73,2	65,8		15			-5,4		3			1,2
	2		20,5	-17,6		16		5,0	7,6		2		48,5	-39,0
	1		71,8	53,6		17			7,6		1			5,0
	0		24,7	-20,2		18		4,1	-6,4					-9,8
2	0	4	47,8	61,2		19			-3,0	5	1	4	7,1	-0,2
	1		31,0	32,6	4	20	-4		-3,6		2		16,1	21,0
	2		18,5	19,8		19			-4,6		3			-3,8
	3		28,7	33,0		18		4,5	7,0		4		16,6	22,4
	4		30,3	-41,0		17			0,0		5			-3,8
	5		19,3	18,0		16		11,9	11,6		6		13,6	-16,0
	6			-7,4		15		15,0	17,4		7		12,5	13,2
	7		13,4	15,2		14			-7,2		8		22,2	-30,0
	8		29,6	41,6		13			8,0		9			3,6
	9		8,0	10,2		12		25,4	-21,8		10			-0,4
	10		8,2	11,8		11			5,8		11			6,0
	11			-2,4		10		17,9	21,2		12		8,2	14,6
	12		11,3	-16,4		9			-6,2		13			6,2
	13			-5,8		8		56,0	51,0		14			-1,0
	14		12,8	-18,2		7		26,2	23,4	6	17	-4		1,0
	15			-7,8		6			-6,8		16		4,9	-5,6
	16		11,0	12,8		5			2,2		15		7,4	8,0
	17			-4,0		4		50,3	-45,6		14		10,5	9,4
	18			9,8		3		31,0	-22,6		13		5,6	-1,4
	19			4,0		2			-0,2		12		13,0	13,0
	20			1,4		1		31,1	-25,8		11		7,7	-8,4
3	20	-4		7,2		0		62,1	50,4		10		13,9	-10,4
	19			-1,0	4	0	4		-5,6		9		14,3	-9,0
	18		8,4	7,6		1		18,6	-24,2		8		40,2	-36,4
	17		6,5	9,0		2		8,7	-8,4		7		20,0	17,8
	16			-5,8		3		31,0	-37,8		6			-1,2
	15			-4,4		4			2,4		5		15,0	9,4
	14			0,8		5		13,8	18,4		4		29,4	22,2
	13		28,0	-26,6		6			-2,6		3		7,8	-5,6
	12		13,4	19,8		7		14,6	20,8		2		12,1	-8,2
	11		13,3	9,8		8		8,9	-12,8		1		15,6	-13,0
	10		13,4	11,8		9			-3,6		0		45,9	-38,6
	9		51,9	53,6		10		13,9	-15,2	6	4	4	15,9	21,2
	8			-9,0		11			-6,6		5			-7,0
	7		38,6	38,6		12			3,0		6			-5,2
	6		39,1	-37,2		13			5,2		7		6,2	-11,2
	5		29,4	-24,2		14			0,8		8		9,1	-12,2
	4		10,7	-4,6		15		9,0	15,4		9			2,0
	3		26,5	-25,2		16			-0,2		10			-5,2
	2		26,8	20,0		17			1,8		11		5,7	10,4
	1		24,9	21,6		17	-4	3,9	-4,4		12			5,2
3	1	4	19,7	24,0		16		10,8	14,8		13			0,4
	2		32,2	41,4		15			-1,2	7	15	-4		1,6
	3		9,4	-12,2		14		16,1	15,8		14			-3,4
	4			2,0		13			-2,6		13		10,1	10,8
	5		18,2	-22,6		12		13,7	-12,0		12		7,1	4,2
	6		27,9	33,0		11		10,0	-4,0		11		5,6	-0,4
	7			2,6		10		18,8	-15,4		10			3,4
	8		13,2	16,4							9		17,4	-16,0

Segue: TABELLA II.

<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	F _o	F _c	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	F _o	F _c	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	F _o	F _c
7	8	—4	8,1	—1,6	8	10	—4	5,5	3,4	8	1	—4	15,0	11,4
	7		11,3	—6,2		9			2,2		0			3,0
	6			—1,8		8			2,4	9	7	—4		2,6
	5		12,8	10,8		7		17,3	—15,2		6		6,6	—6,6
	4		13,6	9,4		6			1,8		5		10,7	—8,6
	3		15,8	10,6		5		13,4	—11,8		4			—1,0
	2		18,5	14,4		4			—3,6		3		6,0	—6,2
	1		19,2	—14,0		3		17,9	14,6		2		4,7	3,6
8	11	—4	9,7	7,6		2			2,4		1		7,6	5,4

TABELLA III.

Distanze ed angoli di legame.

ATOMI	Distanza	ATOMI	Angolo
C ₁ —C ₂	1,41 Å	C ₆ —C ₁ —C ₂	118,7°
C ₂ —C ₃	1,43	C ₁ —C ₂ —C ₃	118,3
C ₃ —C ₄	1,39	C ₂ —C ₃ —C ₄	120,6
C ₄ —C ₅	1,35	C ₃ —C ₄ —C ₅	121,0
C ₅ —C ₆	1,40	C ₄ —C ₅ —C ₆	120,1
C ₆ —C ₁	1,41	C ₅ —C ₆ —C ₁	121,1
C ₆ —C ₇	1,46	C ₁ —C ₆ —C ₇	119,6
C ₇ —C ₈	1,36	C ₅ —C ₆ —C ₇	119,3
C ₈ —C ₉	1,42	C ₆ —C ₇ —C ₈	130,5
C ₉ —O ₂	1,40	C ₆ —C ₇ —N	121,6
O ₂ —N	1,42	N—C ₇ —C ₈	107,9
N—C ₇	1,35	C ₇ —C ₈ —C ₉	110,7
N—C ₁₀	1,46	C ₈ —C ₉ —O ₂	104,5
C ₉ —O ₁	1,19	C ₉ —O ₂ —N	107,6
C ₈ —Br	1,86	O ₂ —N—C ₇	109,2
Br—C ₁	3,57	C ₇ —N—C ₁₀	126,0
Br—O ₁	3,31	O ₂ —N—C ₁₀	109,2
C ₁₀ —C ₅	3,46	O ₂ —C ₉ —O ₁	119,9
C ₁₀ —O ₂	2,34	C ₈ —C ₉ —O ₁	135,6
		C ₉ —C ₈ —Br	120,5
		C ₇ —C ₈ —Br	127,9

Le distanze e gli angoli di legame sono mostrati in fig. 2; gli stessi dati sono elencati nella Tabella III, in cui vengono anche riportate le distanze $\text{Br}-\text{C}_1$, $\text{Br}-\text{O}_1$, $\text{C}_{10}-\text{C}_5$ e $\text{C}_{10}-\text{O}_2$.

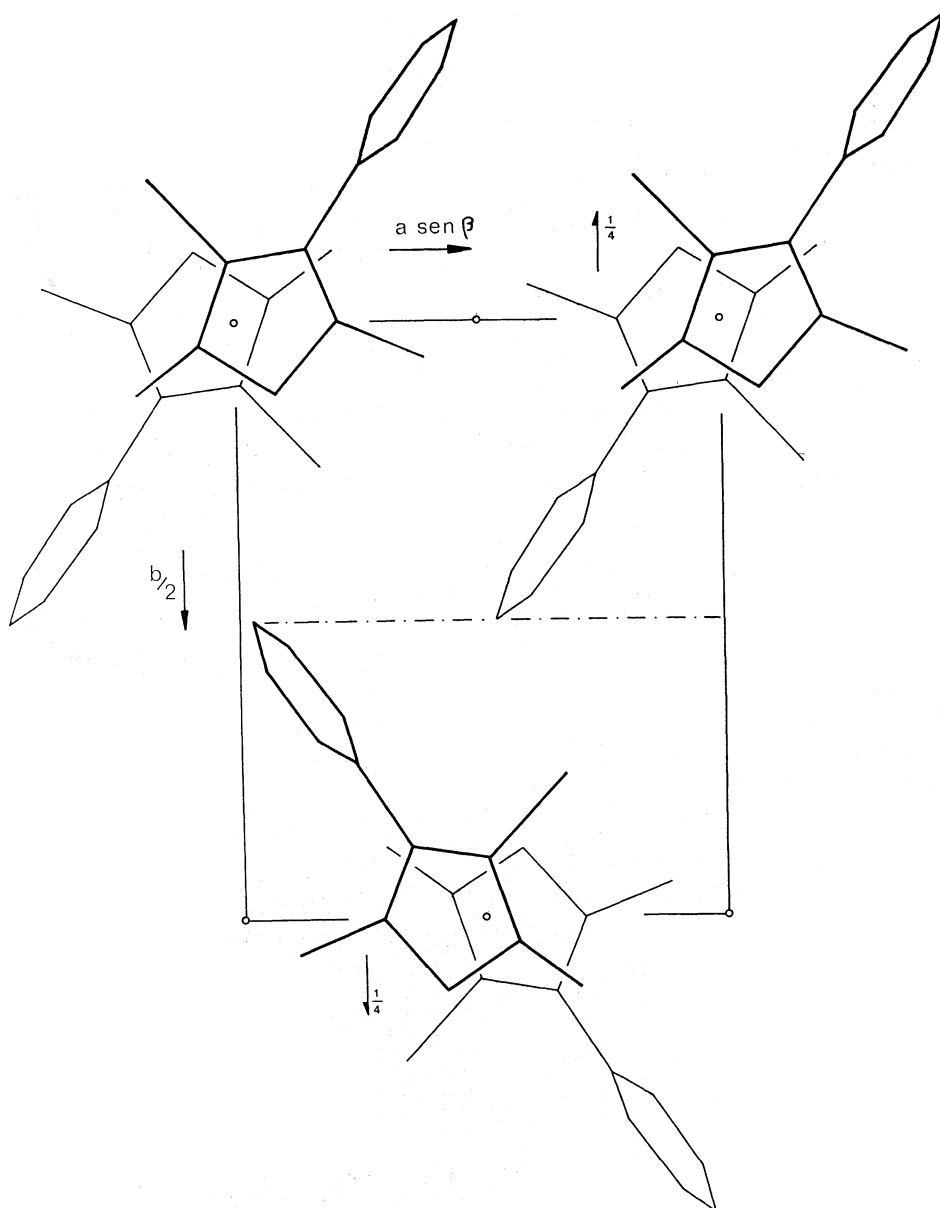


Fig. 1. - Proiezione della struttura lungo l'asse c .

Il piano quadratico medio passante per i cinque atomi costituenti l'anello dell'isossazolina (indicato come piano A) e quello passante per i sei atomi di carbonio costituenti il fenile (piano B) hanno le seguenti equazioni (in coor-

dinate monocline):

$$\text{Piano A} \quad 2,014x - 4,733y + 6,751z - 0,272 = 0$$

$$\text{Piano B} \quad 5,900x - 9,794y + 1,285z + 1,294 = 0$$

Come si vede nella Tabella IV, in cui sono riportate le deviazioni degli atomi dai piani A e B, ciascuno dei due anelli può ritenersi strettamente planare. Le distanze del bromo e del carbonio del gruppo metilico dal piano della isossazolina, rispettivamente di $-0,26$ e $0,80$ Å, indicano una significativa deviazione dalla planarità. Questi scostamenti ed anche la deformazione degli angoli di legame C_7-N-C_{10} e C_7-C_8-Br (vedi fig. 2) possono essere

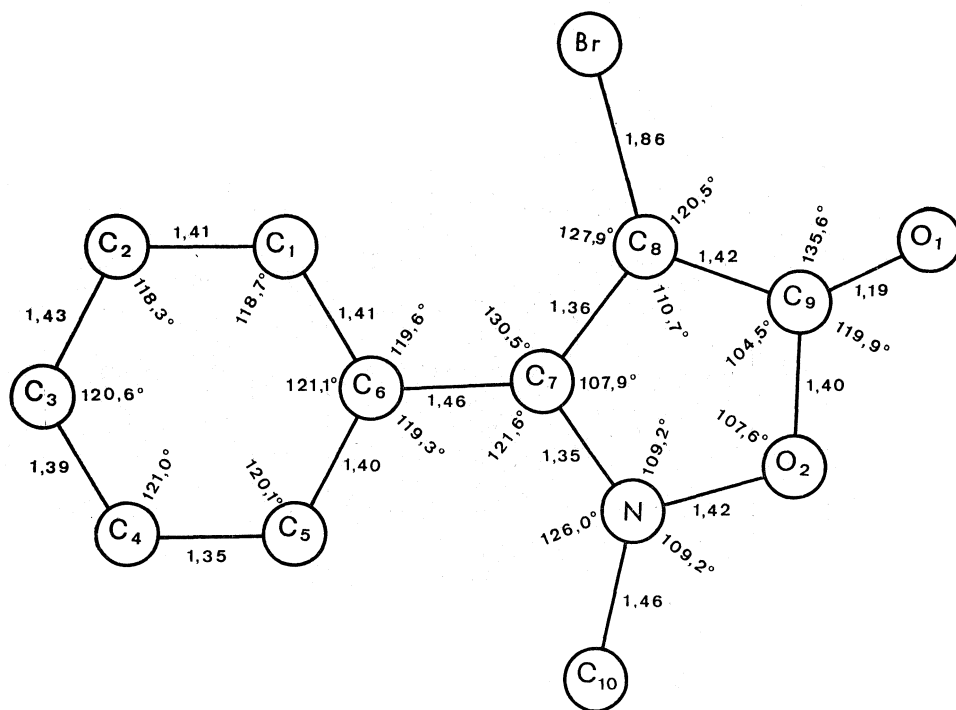


Fig. 2. - Distanze (Å) e angoli di legame della molecola.

spiegati, come era prevedibile, in base all'ingombro sterico del gruppo fenilico. L'ossigeno chetonico O_1 si può ritenere invece pressoché coplanare con il piano A, distando da questo di solo $-0,09$ Å. L'angolo fra i piani A e B è di circa 50° .

Per quel che riguarda l'impacchettamento delle molecole si possono fare le seguenti considerazioni. Ciascuna molecola è in contatto con altre cinque con distanze atomiche intermolecolari inferiori a 4 Å. Nella Tabella V sono riportate tali distanze insieme alle operazioni di trasformazione delle coordinate che permettono di individuare le molecole interessate. Tutti i contatti intermolecolari corrispondono ad interazioni di van der Waals.

TABELLA IV.
Deviazioni dalla planarità.

PIANO A		PIANO B	
ATOMO	Deviazione	ATOMO	Deviazione
O ₂	0,019 Å	C ₁	-0,012 Å
N	-0,016	C ₂	0,020
C ₇	0,007	C ₃	-0,012
C ₈	0,006	C ₄	-0,006
C ₉	-0,015	C ₅	0,015
		C ₆	-0,006

TABELLA V.
Distanze intermolecolari inferiori a 4 Å.

Atomo 1	Atomo 2	Dist. Å	Posizione della molecola	Atomo 1	Atomo 2	Dist. Å	Posizione della molecola
C ₃	O ₁	3,87	$\frac{3}{2}-x, \frac{1}{2}+y, \frac{1}{2}-z$	O ₁	N	3,47	$1-x, 1-y, -z$
C ₃	O ₂	3,50	$\frac{3}{2}-x, \frac{1}{2}+y, \frac{1}{2}-z$	O ₁	C ₅	3,28	$1-x, 1-y, -z$
C ₃	Br	3,66	$1+x, y, z$	O ₁	C ₇	3,88	$1-x, 1-y, -z$
C ₄	Br	3,57	$1+x, y, z$	O ₂	O ₂	3,54	$1-x, 1-y, -z$
C ₅	Br	3,83	$1+x, y, z$	O ₂	N	3,38	$1-x, 1-y, -z$
C ₁₀	O ₁	3,12	$1+x, y, z$	O ₂	C ₅	3,94	$1-x, 1-y, -z$
Br	O ₁	3,88	$1-x, 1-y, 1-z$	O ₂	C ₇	3,44	$1-x, 1-y, -z$
Br	O ₂	3,68	$1-x, 1-y, 1-z$	O ₂	C ₈	3,55	$1-x, 1-y, -z$
Br	C ₉	3,68	$1-x, 1-y, 1-z$	O ₂	C ₉	3,61	$1-x, 1-y, -z$
O ₁	C ₁	3,33	$1-x, 1-y, 1-z$	N	N	3,79	$1-x, 1-y, -z$
O ₁	C ₇	3,77	$1-x, 1-y, 1-z$	N	C ₈	3,71	$1-x, 1-y, -z$
O ₁	C ₈	3,57	$1-x, 1-y, 1-z$	N	C ₉	3,28	$1-x, 1-y, -z$
C ₈	C ₈	3,68	$1-x, 1-y, 1-z$	C ₅	C ₉	3,90	$1-x, 1-y, -z$
C ₈	C ₉	3,50	$1-x, 1-y, 1-z$	C ₇	C ₉	3,77	$1-x, 1-y, -z$
C ₉	C ₉	3,88	$1-x, 1-y, 1-z$				

Gli atomi della colonna 1 sono quelli riportati in Tabella I, gli atomi della colonna 2 sono quelli delle molecole simmetriche di cui si riporta la posizione.

Le distanze di contatto più corte sono la O_1-C_1 di 3,33 Å, la O_1-C_5 di 3,28 Å, la O_2-N di 3,38 Å e la C_9-N di 3,28 Å tutte fra molecole correlate da centri di simmetria. La più corta di tutte è la distanza $C_{10}-O_1$ di 3,12 Å fra la molecola originale e quella ad essa correlata da una traslazione lungo l'asse a .

Per trarre delle considerazioni conclusive circa le deformazioni dovute all'ingombro sterico, nonché per determinare la natura di tutti i legami, è necessario portare avanti il raffinamento utilizzando i fattori termici anisotropi, in quanto è già stata osservata una notevole anisotropia soprattutto per il Br e l' O_1 . Tale raffinamento potrà inoltre consentire il posizionamento dei cinque atomi di idrogeno del gruppo fenilico e degli altri tre del gruppo metilico.

Il completamento di questo studio strutturale sull'isomero 3-aril sostituito verrà eseguito contemporaneamente allo studio di un 4-arile, allo scopo di chiarire i motivi del loro diverso comportamento allo stato solido, come già accennato precedentemente.

BIBLIOGRAFIA.

- [1] F. DE SARLO, L. FABBRINI e G. RENZI, *2-Methylisoxazolin-5-ones-I*, «Tetrahedron», 22, 2989 (1966).
- [2] C. L. CHRIST, *Precision determination of lattice constants of single crystals using the conventional Weissenberg camera*, «Am. Mineralogist», 41, 569 (1956).
- [3] D. D. CROMER e J. T. WABER, *Scattering factors computed from relativistic Dirac-Slater wave functions*, «Acta Cryst.», 18, 104 (1965).