Molecular Structure determination of Trimethy [α-(benzoylmethyl)] benzyl Silane

Taeb. A.*, Bolourtchian, M.* and Tadjarodi, A.*

*Iran University of Science & Technology, Tehran, Iran
**Chemistry & Chemical Engineering Research Center, Tehran, Iran

Keywords: benzoyl methyl, benzyl, Silane, Crystal Structure

Abstract: The Crystal Structure of [α - (benzoylmethyl) benzyl] Silane (CH₃)₃ Si CH (C₆H₅)CH₂ COC₆H₅ has been determined by direct method (SIR). The dimensions of used crystal were 0.7 × 0.3 × 0.2 mm. The molecular structure has been determined by MolEN program. This compound crystalizes in monoclinic space group P2₁/n (14) with four molecules per unit cell. Lattice parameters of this compound are:
a = 6.0938 Å, b = 22.8465 Å, c = 12.0533 Å, β = 92.0605°
After last least - square cycle, the final R and R_w values are 0.087 and 0.093 , respectively.
تعیین ساختار مولکولی تری متیل [بنزوتیل متیل] سیلیان

عباس طالب

محمدرضا چالیان

دانشگاه مهندسی شیمی - دانشگاه علوم و صنعت ایران

پژوهشگاه شیمی و مهندسی شیمی ایران

چکیده: ساختار بلورین ترکیب سنگز شده جدید تری متیل [بنزوتیل متیل] سیلیان (CH3)3SiCH(CH3)CH2COCH3 در روش پراش مسنجر پرتویاکس تغییر شده است. بلورهای این ترکیب در سیستم بلوری تک میل با گروه فضایی (C2h) با چند مولکول در باکتریتیک داشته باشند. پارامترهای باکتریتیکی بیان‌شده در بالا از روابط یکنواختی به دست آمده است:

\[ a = 938 \, \text{Å}, \quad b = 22 \, \text{Å}, \quad c = 533 \, \text{Å}, \quad \alpha = 90^{\circ}, \quad \beta = 96^\circ, \quad \gamma = 94^\circ \]

ساختار بلور با روش سرپ (SIR) و استفاده از مجموعه برنامه کامپیوتری MolEN (MolEN) تغییر شده است و نتایج \( R_w \) و \( R_p \) به همراه تا میزان 0.06 وزنی و 0.06 میزان 0.06، با کاهش یافته‌اند.

واژه‌های کلیدی: بنزوتیل متیل، بنزیل، سیلیان، ساختار بلورین
تعیین ساختار مولکولی تری متیل [\(\times\) (بنزونیل متیل) بنزیل] سیلان

در این مقاله تعبیر ساختار مولکولی این ترکیب مورد بررسی قرار می‌گیرد.

تعیین ساختار مولکولی

بلور مناسبی از نمونه به ابعاد ۲/۰×۲/۰×۲/۰ و میلی متر انتخاب شد و در دستگاه پراش سنج تک بلور پرتوایکس از نوع ۴-۰ تحت شار پرتوایکس Enraf-Nonious CAD-۴۰۰ قرار گرفت. Mo-K\(\alpha\)

روی اطلاعات به دست آمده با استفاده از کامپیوتر VAX ۳۱۰۰ و برنامه کامپیوتری محاسبات انجام شد [۷]. نوع بافت‌های سخت و ابعاد آن و سایر اطلاعات به دست آمده در جدول ۱، مختصات آنها، ضرایب گرمایی، فاصله یوپوندها و زاویه‌های یوپوندی در جدول‌های ۳، ۴ و ۵ مشاهده می‌شوند. بلور در طول مدت جمع آوری داده‌ها باید به‌طور مداوم تعویض شود. ضرایب پراکندگی انتهای مورد استفاده، از جدول‌های مذکور در بلوک‌شناسی استفاده می‌شود و کلیه آنها به‌طور همزمان و سپس تاهاست‌گرد تصحیح شده‌اند.
جدول 1 پارامترهای و داده‌های تجربی

<table>
<thead>
<tr>
<th>فرمول شیمیایی</th>
<th>SiC\textsubscript{18}O\textsubscript{1}H\textsubscript{22}</th>
</tr>
</thead>
<tbody>
<tr>
<td>جرم مولکولی</td>
<td>282/381</td>
</tr>
<tr>
<td>ثابت‌های پایه‌ای یکه</td>
<td>a = 8/1.938 (1) Å</td>
</tr>
<tr>
<td>b = 22/8465 (1) Å</td>
<td></td>
</tr>
<tr>
<td>C = 12/833 (3) Å</td>
<td></td>
</tr>
<tr>
<td>β = 92/8.6 (15)°</td>
<td></td>
</tr>
<tr>
<td>V = 1637/10 (1/0) Å\textsuperscript{3}</td>
<td></td>
</tr>
<tr>
<td>تک مول</td>
<td>سیستم بلوری: P2\textsubscript{1}/n (14)</td>
</tr>
<tr>
<td>چگالی محاسبه شده</td>
<td>1/12 mg/m\textsuperscript{3}</td>
</tr>
<tr>
<td>ابعاد بلور</td>
<td>0.7 x 0.7 x 0.7 mm\textsuperscript{3}</td>
</tr>
<tr>
<td>دما کاراکترولی</td>
<td>K</td>
</tr>
<tr>
<td>لبه</td>
<td>14/20 Å &lt; h &lt; 4</td>
</tr>
<tr>
<td>نمودار جمع آوری داده‌ها</td>
<td>0 &lt; k &lt; 0</td>
</tr>
<tr>
<td>Omega/Theta Scan</td>
<td>نسبت تعادل بازتابهای استاندارد به تناوب اندازه‌گیری آنها:</td>
</tr>
<tr>
<td></td>
<td>تعادل بازتابهای اندازه‌گیری شده:</td>
</tr>
<tr>
<td></td>
<td>بازتابهای مستقل: F\textsubscript{0} &gt; 3σ</td>
</tr>
<tr>
<td>Mo-kα</td>
<td>پرتو:</td>
</tr>
<tr>
<td>ضریب جدبد: (cm\textsuperscript{-1})</td>
<td></td>
</tr>
<tr>
<td>ضریب خاموشی (استهلاک):</td>
<td></td>
</tr>
<tr>
<td>ضریب‌های پراکندگی اتم‌ها:</td>
<td></td>
</tr>
<tr>
<td>پارامترهای حداقل مربوط‌ها:</td>
<td></td>
</tr>
<tr>
<td>ثابت‌های درستی ساختار:</td>
<td></td>
</tr>
<tr>
<td>International Tables (1974)</td>
<td>تابع وزن:</td>
</tr>
<tr>
<td>182</td>
<td>قله بیشینه در اخیرین نقطه اختراف فوریه</td>
</tr>
<tr>
<td>R = \sum</td>
<td>F\textsubscript{0} - F\textsubscript{c}</td>
</tr>
<tr>
<td>\text{R}_{\text{w}} = [\sum W(</td>
<td>F\textsubscript{0}</td>
</tr>
<tr>
<td>= 0/0.931</td>
<td></td>
</tr>
<tr>
<td>31/151 / σ\textsuperscript{2}</td>
<td>روش تعبیه ساختار:</td>
</tr>
</tbody>
</table>
جدول ۲ پارامترهای مکانی و انحراف معیار تقیبی آنها.

<table>
<thead>
<tr>
<th>B(A2)</th>
<th>Z</th>
<th>Y</th>
<th>X</th>
<th>اتم</th>
</tr>
</thead>
<tbody>
<tr>
<td>4/24</td>
<td>0/7329</td>
<td>0/241</td>
<td>0/369</td>
<td>Si</td>
</tr>
<tr>
<td>4/02</td>
<td>0/186</td>
<td>0/824</td>
<td>0/216</td>
<td>C₁</td>
</tr>
<tr>
<td>3/8</td>
<td>0/4083</td>
<td>0/171</td>
<td>0/828</td>
<td>C₃</td>
</tr>
<tr>
<td>3/92</td>
<td>0/227</td>
<td>0/518</td>
<td>0/941</td>
<td>C₇</td>
</tr>
<tr>
<td>6/22</td>
<td>0/456</td>
<td>0/319</td>
<td>0/678</td>
<td>O</td>
</tr>
<tr>
<td>6/52</td>
<td>0/559</td>
<td>0/304</td>
<td>0/407</td>
<td>C₁₃</td>
</tr>
<tr>
<td>5/8</td>
<td>0/1599</td>
<td>0/484</td>
<td>0/762</td>
<td>C₁₁</td>
</tr>
<tr>
<td>5/12</td>
<td>0/106</td>
<td>0/414</td>
<td>0/403</td>
<td>C₈</td>
</tr>
<tr>
<td>6/94</td>
<td>0/218</td>
<td>0/801</td>
<td>0/550</td>
<td>C₁₀</td>
</tr>
<tr>
<td>6/14</td>
<td>0/506</td>
<td>0/519</td>
<td>0/582</td>
<td>C₁₄</td>
</tr>
<tr>
<td>6/12</td>
<td>0/146</td>
<td>0/436</td>
<td>0/238</td>
<td>C₉</td>
</tr>
<tr>
<td>4/72</td>
<td>0/173</td>
<td>0/244</td>
<td>0/199</td>
<td>C₁₆</td>
</tr>
<tr>
<td>2/72</td>
<td>0/896</td>
<td>0/33</td>
<td>0/245</td>
<td>C₂</td>
</tr>
<tr>
<td>6/0</td>
<td>0/184</td>
<td>0/452</td>
<td>0/596</td>
<td>C₆</td>
</tr>
<tr>
<td>6/24</td>
<td>0/499</td>
<td>0/41</td>
<td>0/482</td>
<td>C₁₂</td>
</tr>
<tr>
<td>7/9</td>
<td>0/189</td>
<td>0/408</td>
<td>0/082</td>
<td>C₁₃</td>
</tr>
<tr>
<td>6/0</td>
<td>0/835</td>
<td>0/423</td>
<td>0/133</td>
<td>C₅</td>
</tr>
<tr>
<td>6/0</td>
<td>0/593</td>
<td>0/217</td>
<td>0/453</td>
<td>C₄</td>
</tr>
</tbody>
</table>

اعداد درون پرانتز، انحراف معیارهای تقیبی با کمترین ارقام با معنی هستند.
نتایج

عملکوداری تری متیل [α-(بندزولیل متیل) بنسیل] سیلان

در شکل 1 نشان داده شده است. بلورهای (CH₃₃)SiCH(C₆H₅)CH₂COC₆H₅
این ترکیب در سیستم بلوری تک میل (موتکلنیک) و گروه فضایی P2₁/n می‌شوند. مقادیر هاله‌ای R و R_w برای R₃3/1 بازتاب اندازه‌گیری شده به ترتیب 0.86/0 و 0.93/0 است. تعداد مولکول‌های در یاکتیکه یک جهار است که در شکل 2
عرضه شده است. براساس داده‌های جدول‌های 3 و 4، اتم Si ساختار چهار وجهی دارد. [8] ولی در این ترکیب به دلیل اتصال Me₃SiH گروه‌های مترکب تری متیل سیلنیل سیلنیل به‌طور طولیوند لی 1/88 Å بعیده ترین سیلنیل به جای اتم هیدروژن باعث می‌شود که طول یوند
مانتند دی متیل فنیل سیلنیل به جای اتم هیدروژن باعث می‌شود که طول یوند
1/915 Å بعیده ترین سیلنیل به جای اتم هیدروژن باعث می‌شود که طول یوند
1/88 Å بعیده ترین سیلنیل به جای اتم هیدروژن باعث می‌شود که طول یوند

جدول ۳ فاصله پیوندها بر حسب آنگستروم

<table>
<thead>
<tr>
<th>فاصله</th>
<th>اتم ۲</th>
<th>اتم ۱</th>
<th>فاصله</th>
<th>اتم ۲</th>
<th>اتم ۱</th>
</tr>
</thead>
<tbody>
<tr>
<td>1/905(9)</td>
<td>C₃</td>
<td>Si</td>
<td>(0)</td>
<td>C₁₄</td>
<td>C₁₃</td>
</tr>
<tr>
<td>1/900(6)</td>
<td>C₆</td>
<td>Si</td>
<td>1/381</td>
<td>C₁₈</td>
<td>C₁₃</td>
</tr>
<tr>
<td>1/878(5)</td>
<td>C₅</td>
<td>Si</td>
<td>1/410(0)</td>
<td>C₁₀</td>
<td>C₁₁</td>
</tr>
<tr>
<td>1/878(5)</td>
<td>C₄</td>
<td>Si</td>
<td>1/381(0)</td>
<td>C₁₂</td>
<td>C₁₁</td>
</tr>
<tr>
<td>1/895(5)</td>
<td>C₇</td>
<td>C₁</td>
<td>1/411(0)</td>
<td>C₉</td>
<td>C₈</td>
</tr>
<tr>
<td>1/252(7)</td>
<td>O</td>
<td>C₁</td>
<td>1/337(0)</td>
<td>C₉</td>
<td>C₁₀</td>
</tr>
<tr>
<td>1/590(9)</td>
<td>C₁₃</td>
<td>C₁</td>
<td>1/380(0)</td>
<td>C₁₅</td>
<td>C₁₄</td>
</tr>
<tr>
<td>1/518(9)</td>
<td>C₁₃</td>
<td>C₁</td>
<td>1/428(0)</td>
<td>C₁₅</td>
<td>C₁₄</td>
</tr>
<tr>
<td>1/594(9)</td>
<td>C₁₃</td>
<td>C₁</td>
<td>1/400(0)</td>
<td>C₁₇</td>
<td>C₁₆</td>
</tr>
<tr>
<td>1/584(9)</td>
<td>C₁₃</td>
<td>C₁</td>
<td>1/383(0)</td>
<td>C₁₇</td>
<td>C₁₆</td>
</tr>
<tr>
<td>1/594(9)</td>
<td>C₁₃</td>
<td>C₁</td>
<td>1/425(0)</td>
<td>C₁₇</td>
<td>C₁₆</td>
</tr>
<tr>
<td>1/418(9)</td>
<td>C₁₃</td>
<td>C₁</td>
<td>1/346(0)</td>
<td>C₁₇</td>
<td>C₁₆</td>
</tr>
</tbody>
</table>
شکل 1 تصویر یک ترکیب تری مثبته بنزنیل سیلانORTEP

شکل 2 تصویر پایانی یک ترکیب تری مثبته بنزنیل سیلان که چهار مولکول را در بر می‌گیرد
این صفحه متشکل از یک جدول است که در آن به اعداد و مقدار معیارهای تقریبی با کمترین ارقام معنی‌داری اشاره می‌شود.

<table>
<thead>
<tr>
<th>علامت</th>
<th>سیم</th>
<th>آتم ۱</th>
<th>آتم ۲</th>
<th>آتم ۳</th>
<th>آتم ۴</th>
<th>آتم ۵</th>
</tr>
</thead>
<tbody>
<tr>
<td>C۶</td>
<td>Si</td>
<td>C۳</td>
<td>C۱۴</td>
<td>C۱۳</td>
<td>C۳</td>
<td></td>
</tr>
<tr>
<td>C۷</td>
<td>Si</td>
<td>C۳</td>
<td>C۱۸</td>
<td>C۱۳</td>
<td>C۹</td>
<td></td>
</tr>
<tr>
<td>C۸</td>
<td>Si</td>
<td>C۳</td>
<td>C۱۸</td>
<td>C۱۳</td>
<td>C۹</td>
<td></td>
</tr>
<tr>
<td>C۹</td>
<td>Si</td>
<td>C۶</td>
<td>C۱۲</td>
<td>C۱۱</td>
<td>C۱۰</td>
<td></td>
</tr>
<tr>
<td>C۱۰</td>
<td>Si</td>
<td>C۶</td>
<td>C۹</td>
<td>C۱۱</td>
<td>C۱۱</td>
<td></td>
</tr>
<tr>
<td>C۱۱</td>
<td>O</td>
<td>C۷</td>
<td>C۱۵</td>
<td>C۱۴</td>
<td>C۱۳</td>
<td></td>
</tr>
<tr>
<td>C۱۲</td>
<td>C۱</td>
<td>C۷</td>
<td>C۱۱</td>
<td>C۱۴</td>
<td>C۱۳</td>
<td></td>
</tr>
<tr>
<td>C۱۳</td>
<td>Si</td>
<td>C۷</td>
<td>C۱۱</td>
<td>C۱۴</td>
<td>C۱۳</td>
<td></td>
</tr>
<tr>
<td>C۱۴</td>
<td>Si</td>
<td>C۷</td>
<td>C۱۱</td>
<td>C۱۴</td>
<td>C۱۳</td>
<td></td>
</tr>
<tr>
<td>C۱۵</td>
<td>Si</td>
<td>C۷</td>
<td>C۱۱</td>
<td>C۱۴</td>
<td>C۱۳</td>
<td></td>
</tr>
<tr>
<td>C۱۶</td>
<td>Si</td>
<td>C۷</td>
<td>C۱۱</td>
<td>C۱۴</td>
<td>C۱۳</td>
<td></td>
</tr>
</tbody>
</table>

<table>
<thead>
<tr>
<th>علامت</th>
<th>سیم</th>
<th>آتم ۱</th>
<th>آتم ۲</th>
<th>آتم ۳</th>
<th>آتم ۴</th>
<th>آتم ۵</th>
</tr>
</thead>
<tbody>
<tr>
<td>C۱۷</td>
<td>Si</td>
<td>C۷</td>
<td>C۱۸</td>
<td>C۱۷</td>
<td>C۱۳</td>
<td></td>
</tr>
<tr>
<td>C۱۸</td>
<td>Si</td>
<td>C۷</td>
<td>C۱۸</td>
<td>C۱۷</td>
<td>C۱۳</td>
<td></td>
</tr>
<tr>
<td>C۱۹</td>
<td>Si</td>
<td>C۷</td>
<td>C۱۸</td>
<td>C۱۷</td>
<td>C۱۳</td>
<td></td>
</tr>
<tr>
<td>C۲۰</td>
<td>Si</td>
<td>C۷</td>
<td>C۱۸</td>
<td>C۱۷</td>
<td>C۱۳</td>
<td></td>
</tr>
</tbody>
</table>

این جدول نشان‌دهنده‌ی اعداد به‌معنایی‌ترین ارقام معنی‌داری است که در آماری بزرگ‌تر از آن‌ها قرار نمی‌گیرد.
### جدول پارامترهای جابجایی عمومی - U

<table>
<thead>
<tr>
<th>انیم</th>
<th>U(1)</th>
<th>U(2)</th>
<th>U(3)</th>
<th>U(4)</th>
<th>U(5)</th>
</tr>
</thead>
<tbody>
<tr>
<td>Si</td>
<td>1.44</td>
<td>0.72</td>
<td>0.50</td>
<td>0.48</td>
<td>0.46</td>
</tr>
<tr>
<td>C1</td>
<td>0.99</td>
<td>0.56</td>
<td>0.40</td>
<td>0.38</td>
<td>0.36</td>
</tr>
<tr>
<td>C3</td>
<td>0.90</td>
<td>0.50</td>
<td>0.35</td>
<td>0.33</td>
<td>0.31</td>
</tr>
<tr>
<td>C7</td>
<td>0.99</td>
<td>0.58</td>
<td>0.44</td>
<td>0.42</td>
<td>0.40</td>
</tr>
<tr>
<td>O</td>
<td>1.00</td>
<td>0.50</td>
<td>0.35</td>
<td>0.33</td>
<td>0.31</td>
</tr>
<tr>
<td>C13</td>
<td>0.99</td>
<td>0.56</td>
<td>0.40</td>
<td>0.38</td>
<td>0.36</td>
</tr>
<tr>
<td>C11</td>
<td>0.90</td>
<td>0.50</td>
<td>0.35</td>
<td>0.33</td>
<td>0.31</td>
</tr>
<tr>
<td>C8</td>
<td>1.00</td>
<td>0.50</td>
<td>0.35</td>
<td>0.33</td>
<td>0.31</td>
</tr>
<tr>
<td>C10</td>
<td>0.99</td>
<td>0.56</td>
<td>0.40</td>
<td>0.38</td>
<td>0.36</td>
</tr>
<tr>
<td>C14</td>
<td>0.99</td>
<td>0.56</td>
<td>0.40</td>
<td>0.38</td>
<td>0.36</td>
</tr>
<tr>
<td>C9</td>
<td>1.00</td>
<td>0.50</td>
<td>0.35</td>
<td>0.33</td>
<td>0.31</td>
</tr>
<tr>
<td>C16</td>
<td>0.99</td>
<td>0.56</td>
<td>0.40</td>
<td>0.38</td>
<td>0.36</td>
</tr>
<tr>
<td>C18</td>
<td>0.99</td>
<td>0.56</td>
<td>0.40</td>
<td>0.38</td>
<td>0.36</td>
</tr>
<tr>
<td>C2</td>
<td>1.00</td>
<td>0.50</td>
<td>0.35</td>
<td>0.33</td>
<td>0.31</td>
</tr>
<tr>
<td>C6</td>
<td>0.99</td>
<td>0.56</td>
<td>0.40</td>
<td>0.38</td>
<td>0.36</td>
</tr>
<tr>
<td>C12</td>
<td>0.99</td>
<td>0.56</td>
<td>0.40</td>
<td>0.38</td>
<td>0.36</td>
</tr>
<tr>
<td>C15</td>
<td>0.99</td>
<td>0.56</td>
<td>0.40</td>
<td>0.38</td>
<td>0.36</td>
</tr>
<tr>
<td>C5</td>
<td>1.00</td>
<td>0.50</td>
<td>0.35</td>
<td>0.33</td>
<td>0.31</td>
</tr>
<tr>
<td>C17</td>
<td>0.99</td>
<td>0.56</td>
<td>0.40</td>
<td>0.38</td>
<td>0.36</td>
</tr>
<tr>
<td>C4</td>
<td>1.00</td>
<td>0.50</td>
<td>0.35</td>
<td>0.33</td>
<td>0.31</td>
</tr>
</tbody>
</table>


