

УДК 548.737

**КРИСТАЛЛИЧЕСКОЕ СТРОЕНИЕ ТРЕХ СОЛЬВАТОВ
1,1'-БИНАФТИЛ-2,2'-БИКАРБОНОВОЙ КИСЛОТЫ С 2-ПИКОЛИНОМ****Л.Ю. Изотова¹, Д.М. Ашуров¹, С.А. Талипов¹, Б.Т. Ибрагимов¹, Э. Вебер²**¹Институт биоорганической химии им. А.С. Садыкова АН РУз, Ташкент, Узбекистан

E-mail: l_izotova@yahoo.com

²Институт органической химии Технического университета горной академии, Фрейберг, Германия

Статья поступила 29 февраля 2012 г.

С доработки — 12 апреля 2012 г.

Из растворов в 2-пиколине (2-метилпиридине) в зависимости от температуры кристаллизации универсальный клатратоген — 1,1'-бинафтил-2,2'-бикарбоновая кислота (ББК) — осаждается в виде кристаллов трех типов различного состава и строения: при обычных условиях (комнатная температура) образуются кристаллы дисольвата ББК с 2-пиколином, при понижении температуры на 20 °С кристаллизуется дигидрат моносолювата, а при повышении температуры на такую же величину — моносолюват, т.е. по мере увеличения температуры кристаллизации количество включаемых гостевых молекул постепенно уменьшается и пространство, в котором они располагаются, становится более замкнутым. В сольвате ББК/2-пиколин/Н₂О состава 1:1:2 (пр. гр. $P2_1/n$, $a = 11,991(2)$, $b = 9,317(2)$, $c = 22,283(5)$ Å, $\beta = 99,77(3)^\circ$, $V = 2453,3(9)$ Å³, $Z = 4$) карбоксильные группы молекулы ББК при атоме С21 депротонированы и освобожденный протон переходит к атому азота 2-пиколина. Молекулы ББК вместе с молекулами 2-пиколина и воды посредством Н-связей образуют бесконечные цепочки в направлении [111], которые, в свою очередь, сшиваются в бесконечные двухмерные слои, параллельные плоскости (–101). Молекулы 2-пиколина находятся в каналах. В дисольвате ББК/2-пиколин (пр. гр. C_2/c , $a = 11,7523(11)$, $b = 13,8563(13)$, $c = 17,9615(13)$ Å, $\beta = 108,044(9)^\circ$, $V = 2781,1(4)$ Å³, $Z = 4$) одна молекула ББК и две молекулы 2-пиколина, связанные через водородную связь, образуют 0-мерный ассоциат типа **G—H—G**. Молекулы растворителя также расположены в каналах. В моносолювате ББК/2-пиколин (пр. гр. $P2_1/c$, $a = 9,299(5)$, $b = 12,727(5)$, $c = 19,011(5)$ Å, $\beta = 95,248(5)^\circ$, $V = 2240,5(16)$ Å³, $Z = 4$) каждая молекула ББК Н-связана с молекулой 2-пиколина, образуя 0-мерный ассоциат типа **H—G**. Гостевые молекулы расположены в закрытых полостях.

Ключевые слова: 1,1'-бинафтил-2,2'-бикарбоновая кислота, полиморфизм сольватобразования, 2-пиколин, кристаллическая структура.

ВВЕДЕНИЕ

В основу кристаллоинженерии [1–4] положен принцип самоорганизации молекул в кристаллическом состоянии посредством слабых, нековалентных связей. Чаще всего этот процесс образования кристалла происходит через формирование супрамолекулярных синтонов [5] — комплиментарных, устойчивых водородных связей между функциональными группами компонент комплекса. Выяснение закономерностей формирования супрамолекулярных синтонов является ключевым в получении фармацевтических сокристаллов [6], играющих исключительно важную роль в создании лекарств с заданными свойствами.