

DETERMINACION DEL GRUPO ESPACIAL DEL P-P'-DIBROMO-DIFENIL-SULFOXIDO * **

A. G. AMIT

Laboratorio de Cristalografía.
Facultad de Química y Farmacia. Montevideo

Los cristales de p-p'-dibromo-difenil-sulfóxido, $C_{12}H_8Br_2OS$, recristalizados con éter sulfúrico, tienen forma de "cabeza de lanza", no correspondiendo el eje mayor de la forma externa con un eje cristalográfico, habiendo entre ellos un ángulo de aproximadamente 20° . La cara principal es paralela al eje b.

El trabajo fue realizado utilizando un equipo Philips PW 1010, con cámara Weisseberg tipo "Nonius", anticátodo de cobre y filtro de níquel.

Los diagramas obtenidos señalan que los cristales pertenecen al sistema monoclinico, siendo la simetría de difracción $2/m$.

Las dimensiones de la celda elemental son las siguientes:

- a) 16.25 \AA .
- b) 10.11 \AA $\beta = 94_0^\circ$
- c) 7.39 \AA .

(Estas medidas tienen un error de medio por ciento.)

El volumen de la celda elemental es:

$$V = a \times b \times c \times \text{sen } \beta = 1210 \times 10^{-24} \text{ cm}^3$$

y el Peso Molecular es $M = 358$.

* Trabajo realizado bajo la guía del Dr. Sven Furberg, como parte de un proyecto de Asistencia Técnica en Cristalografía de UNESCO.

** La substancia fue preparada por el Profesor Contratado de esta Facultad, Q. F. Hugo M. Cappi.

La densidad fue determinada por el método de flotación, usando una solución de yodomercuriato de potasio y agua. Se obtuvo así el valor

$$\rho_0 = 1.69_1 \text{ gr. cm}^{-3}$$

El número de moléculas es de N:

$$N = \frac{V \times \rho}{M \times 1.66 \times 10} = 3.99$$

de modo que hay 4 moléculas por celda elemental. La densidad calculada es de $\rho_c = 1.69_4 \text{ gr. cm}^{-3}$.

Se concluye a partir de las reflexiones obtenidas en los diagramas de Weisseberg que:

Las reflexiones hkl están presentes solamente cuando se cumple que $h + k = 2n$;

las reflexiones h0l están presente cuando $h = 2n$;

las reflexiones 0k0 están presente cuando $k = 2n$.

De los grupos espaciales monoclinicos, hay tres que cumplen estas condiciones de extinciones sistemáticas:

- 1) C 2/m (C_{2h}^3)
- 2) C m (C_s^3)
- 3) C 2 (C_2^3)

A los efectos de dilucidar este problema se trabajó con modelos a escala ($1 \text{ \AA} = 2 \text{ cm.}$) de las moléculas y de celda elemental, considerando la posición de las moléculas de acuerdo con los elementos de simetría correspondientes a cada uno de los grupos enumerados.

Se consideró, según Rheinboldt y Giesbrecht (1946), la configuración tetraédrica o "atribuyendo a la molécula la configuración de una pirámide trilateral con el átomo de S en uno de los vértices".

Abrahams y Grenville-Wells (1956), trabajando con el difenilsulfóxido, determinaron una configuración piramidal con los ángulos de enlace C-S-O de 106° y de C-S-C de $97 \frac{1}{2}^\circ$.

En base a consideraciones espaciales y de simetría, fueron desechados los grupos 1) y 2), debido a que la relación de tamaño entre las moléculas y la celda elemental no las permitía adecuarse a las operaciones inherentes a estos grupos espaciales, asignándosele al p-p'-dibromo-difenil-sulfóxido el grupo espacial



Consideramos, además, que los cristales pueden ser piro y piezoeléctricos, dado el tipo de simetría que poseen.

Bibliografía

- (1) **Garrido y Orland:** Los rayos X y la estructura fina de los cristales. Dossat, 1946.
- (2) **Buerger, M. J.:** R-Ray Crystallography. Wiley, 1949.
- (3) **Henry, Lipson and Wooster:** The Interpretation of X-Ray diffraction photographs, 1951.
- (4) **Bragg and Bragg:** The Crystalline State, Bell & Sons, 1949.
- (5) Structure Reports for 1945-1946, vol. 10.
- (6) **Pauling, L.:** La nature de la liaison chimique et la structure des molecules et des cristaux. Presses Universitaires de France, 1949.
- (7) **Rheinbolt, H. and Giesbrecht, E.:** Journal of American Chemical Soc., 68, 976, 1946.
- (8) **Abrahams, E. C. and Silverton, J. V.:** Acta Cryst., 9, 281, 1956.

Montevideo, 11 de diciembre de 1956.