

PŔOVODNÉ OZNÁMENIA

Stanovenie molekulej váhy cyaneínu röntgenograficky

L. ULICKÝ

Katedra fyzikálnej chémie Slovenskej vysokej školy technickej, Bratislava

Cyaneín je nové antifugálne antibiotikum, ktoré z *Penicillium cyaneum S-11* izolovali V. Betina a spolupracovníci [1]. Jeho empirický vzorec, zistený elementárnou analýzou, je C_4H_6O [2]: Skutočný vzorec možno určiť len po stanovení molekulej váhy. Keďže cyaneín je iba nepatrne rozpustný v bežných organických rozpúšťadlách [1], bolo by obťažné zistiť jej hodnotu metódou stanovenia v roztoku. Z toho dôvodu sa molekulej váha stanovila röntgenograficky.

Experimentálna časť

Monokryštály cyaneínu, získané kryštalizáciou z etylacetátového roztoku, tvoria bežfarebné hranolčky o hrúbke niekoľko desiatín milimetra a dĺžke do dvoch milimetrov.

Röntgenové snímky sa získali na prístroji Mikrometa žiarením CuK (λ $CuK_{\alpha}^- = 1,5418 \text{ \AA}$) za použitia niklového filtra. Použila sa Buergerova precesná metóda (snímkovalo sa na komore podľa F. Hanica a J. Madara [3]), metóda otáčaného kryštálu a Weissenbergova metóda. Hustota sa stanovila pyknometricky vo vode.

Výsledky

Precesnou metódou a metódou otáčaného kryštálu sa zistili základné kryštalografické údaje. Za os c sa zvolil smer rastu kryštálov. Z difrakčných snímok zón typu $hk0$, $h0l$, $0kl$ sa stanovili mriežkové konštanty:

$$\begin{aligned} a &= 19,075 \pm 0,075 \text{ \AA}, \\ b &= 11,041 \pm 0,018 \text{ \AA}, \\ c &= 7,418 \pm 0,021 \text{ \AA}. \end{aligned}$$

Medziosové uhly sú pravé.

Systematické vynechávanie difrakcií vyjadrujú tieto podmienky:

- hkl — prítomné všetky difrakcie,
- $0kl$ — prítomné všetky difrakcie,
- $h0l$ — prítomné všetky difrakcie,
- $hk0$ — prítomné všetky difrakcie,
- $h00$ — prítomné difrakcie s $h = 2n$,
- $0k0$ — prítomné difrakcie s $k = 2n$,
- $00l$ — prítomné difrakcie s $l = 2n$.

Z uvedených podmienok vyplýva, že cyaneín kryštalizuje v rombickej sústave, priestorová grupa je $P2_12_12_1 (D_2^4)$.

Lubovoľná pozícia v priestorovej grupe $P2_12_12_1$ je štvornásobná, čo oprávňuje predpokladať, že počet molekúl v základnej bunke je $Z = 4$. Z nameranej hustoty $\rho = 1,191 \pm 0,007 \text{ g/cm}^3$ a objemu základnej bunky vychádza molekulová váha cyaneínu $M = 280,1 \pm 1,6$. Uvedená hodnota vyhovuje štvornásobku hodnoty vypočítanej pre empirický vzorec ($M = 280,36728$). Skutočný vzorec cyaneínu je teda $C_{16}H_{24}O_4$.

Ďakujem inž. V. Betinovi, C. Sc., za poskytnutie vzorky cyaneínu.

Súhrn

Precesnou metódou a metódou otáčaného kryštálu sa zistili základné kryštalografické údaje cyaneínu. Základná bunka s rozmermi

$$\begin{aligned} a &= 19,075 \pm 0,075 \text{ \AA}, \\ b &= 11,041 \pm 0,018 \text{ \AA}, \\ c &= 7,418 \pm 0,021 \text{ \AA} \end{aligned}$$

patrí do rombickej sústavy, priestorová grupa symetrie je $P2_12_12_1 (D_2^4)$. Za predpokladu, že základná bunka obsahuje štyri molekuly, molekulová váha cyaneínu je $280,1 \pm 1,6$, čo vyhovuje sumárnemu vzorcu $C_{16}H_{24}O_4$.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ МОЛЕКУЛЯРНОГО ВЕСА ЦИАНЕИНА РЕНТГЕНОГРАФИЧЕСКИМ МЕТОДОМ

Л. Улицки

Кафедра физической химии Словацкого политехнического института,
Братислава

Прецессионным методом и методом вращающегося кристалла определены основные кристаллографические параметры цианеина. Элементарная ячейка с размерами:

$$\begin{aligned} a &= 19,075 \pm 0,075 \text{ \AA}, \\ b &= 11,041 \pm 0,018 \text{ \AA}, \\ c &= 7,418 \pm 0,021 \text{ \AA} \end{aligned}$$

принадлежит к ромбической системе, пространственная группа симметрии $P2_12_12_1 (D_2^4)$. Если предположить, что элементарная ячейка содержит четыре молекулы, тогда молекулярный вес цианеина $280,1 \pm 1,6$, что удовлетворяет простейшей формуле $C_{16}H_{24}O_4$.

RÖNTGENOGRAPHISCHE MOLEKULARGEWICHTSBESTIMMUNG
VON CYANEIN

L. Ulický

Lehrstuhl für physikalische Chemie an der Slowakischen Technischen Hochschule,
Bratislava

Mittels Präzessionsmethode und Drehkristallmethode wurden kristallographische Grundwerte über Cyanein ermittelt. Die Elementarzelle mit den Abmessungen

$$a = 19,075 \pm 0,075 \text{ \AA},$$

$$b = 11,041 \pm 0,018 \text{ \AA},$$

$$c = 7,418 \pm 0,021 \text{ \AA}$$

gehört in das rhombische System, die Raumgruppe ist $P2_12_12_1 (D_2^4)$. Unter der Voraussetzung, dass in der Elementarzelle vier Moleküle enthalten sind, beträgt das Molekulargewicht von Cyanein $280,1 \pm 1,6$; dies entspricht der Bruttoformel $C_{16}H_{24}O_4$.

LITERATÚRA

1. Betina V., Nemeč P., Dobias J., Baráth Z., *Folia microbiol.* **7**, 353 (1962).
2. Kováč Š., súkromné oznámenie.
3. Hanič F., Mačar J., *Mat.-fyz. časopis SAV* **6**, 21 (1956).

Do redakcie došlo 21. 5. 1963

*Adresa autora:**Inž. Ladislav Ulický, C. Sc., Katedra fyzikálnej chémie SVŠT, Bratislava, Kollárovo nám. 2.*