

2-Methyl-3-(N-trimethyl ammonium)phenol Iodide의 결정 구조

趙誠一 · 尹惠淑 · 具廷會

서울대학교

(Received April 16, 1980)

Sung Il Cho, Hye Sook Yun and Chung Hoe Koo

Seoul National University, Seoul 151, Korea

The Crystal Structure of 2-Methyl-3-(N-trimethyl ammonium)phenol Iodide

Abstract—The crystal and molecular structure of 2-methyl-3-(N-trimethyl ammonium)phenol iodide, $C_{10}H_{16}NOI$, was determined by X-ray diffraction method. The compound crystallizes in the orthorhombic space group P_{na2_1} with $a=13.327(3)$, $b=12.496(3)$, $c=7.227(2)\text{\AA}$ and $Z=4$. A total of 489 independent observed reflections were collected by the automated Four-circle diffractometer and was solved by heavy atom method and refined by anisotropic block-diagonal least-squares method to the R value of 0.04. The benzene ring is slightly distorted from regular hexagon. The I atom and 2-methyl-3-(N-trimethyl ammonium)phenol group is held together by van der Waals forces in the crystal. Intermolecular hydrogen bond is of the type $O-H\cdots I$ with the length 3.35\AA. Apart from the hydrogen bonding system the molecules are held together by van der Waals forces in the crystal.

2-methyl-3-(N-trimethyl ammonium)phenol iodide의 결정 구조를 밝힘으로서 I 원자와 trimethyl ammonium group 및 -OH group 사이의 수소결합 관계를 밝히고 아울러 분자간 결합을 구명하는 것을 목적으로 한다.

실 험 방 법

2-methyl-3-(N-trimethyl ammonium) phenyl acetate iodide 메타놀 용액을 실온에서 서서히 증발시켜 프리즘 모양의 투명한 단결정을 얻었다. 진동 및 와이젠버그 사진으로 부터 이 결정이 공간군 P_{na2_1} 에 속하는 사방정계임을 알았다.

강도 측정을 위하여 사용한 단결정의 크기는 $0.2 \times 0.2 \times 0.5\text{mm}$ 이었다. 시료의 밀도는 벤젠과 사염화탄소의 혼합용액중에서 부유법에 의하여 측정하였다. 세포상수는 Mo $K\alpha$ 선을 사용하여 Rigaku-Denki 자동 4축 회절계를 써서 측정된 20개 회절반점을 최소자승법으로 정밀화 하여서 얻었다. $2\theta < 50^\circ$ 범위에서 $\omega-2\theta$ scan technique을 이용하여 $4^\circ/\text{min}$ 의 scan speed로 580개의 독립적 회절반점을 얻었고 $3 \times \sigma(F)$ 보다 큰 489개의 F값을 취한 Data를 윌슨법 (Wilson's method)¹⁾으로 절대척도로 변환시켰다. Table I에 결정학적 수치를 표시한다. 모든 계산은 CYBER 73 computer를 이용하였다.

Table I—Crystal data

Formula	: C ₁₀ H ₁₆ NOI
Formula weight	: 293.16
Crystal system	: Orthorhombic
Space group	: P _{na2} ₁
a	: 13.327(3) Å
b	: 12.496(3)
c	: 7.227(2)
Z	: 4
Dm	: 1.61g·cm ⁻³
Dc	: 1.62

구조 해석 및 정밀화

구조인자를 표준화 구조인자로 변화시킨 후 관측된 모든 반사를 이용하여 Patterson 합성을 하였다. 이 결과를 이용하여 분자내의 I 원자의 대략적인 좌표를 결정하였다. I 원자로 계산한 구조인자의 위상을 이용하여 Fourier 합성을 한 결과 수소를 제외한 모든 원자의 대략적인 좌표를 결정하였다. 구조의 정밀화는 최소자승법을 이용하여 계산하였으며 최종 R 값

은 0.04이었다. 이때 weighting scheme의 계산에는 Cruick-shank²⁾에 의하여 제안된 식을 이용하였으며 atomic scattering factor International Tables for X-ray Crystallography³⁾에 기재된 값을 사용하였다. 최종으로 얻은 atomic coordinates 및 thermal parameter를 Table II에 표시하였고 observed structure factor와 calculated structure factor 값을 표 III에 표시하였다. 필요한 모든 계산은 Shiono⁴⁾의 결정학적 프로그램을 FACOM에 맞춰 개발한 프로그램을 이용하였다.

Table II—Final atomic coordinates and thermal parameters with e. s. d.'s in parenthesis. Key to Key to the atomic numbering is given in Fig. 1. The temperature factor expression used was $\exp \{-(h^2\beta_{11} + k^2\beta_{22} + l^2\beta_{33} + 2hk\beta_{12} + 2hl\beta_{13} + kl\beta_{23})\}$

Atoms	x	y	z	β_{11}	β_{22}	β_{33}	β_{12}	β_{13}	β_{23}
I	0.3684(1)	0.6404(1)	0.005(2)	0.010(0)	0.007(0)	0.020(0)	0.001(0)	0.002(1)	0.001(1)
N	0.411(1)	0.281(1)	0.033(3)	0.010(1)	0.012(1)	0.029(4)	0.000(1)	0.000(2)	-0.002(2)
C(1)	0.507(2)	0.341(2)	-0.018(5)	0.013(2)	0.016(2)	0.043(8)	-0.001(2)	-0.008(4)	0.006(5)
C(2)	0.351(2)	0.320(2)	0.189(4)	0.011(2)	0.011(2)	0.038(7)	-0.001(1)	-0.006(3)	0.001(3)
C(3)	0.365(2)	0.296(2)	-0.161(4)	0.020(3)	0.016(3)	0.042(9)	0.006(2)	-0.007(4)	0.000(4)
C(4)	0.443(2)	0.166(1)	0.022(4)	0.013(2)	0.008(2)	0.025(5)	0.003(1)	0.008(4)	0.006(3)
C(5)	0.363(2)	0.086(2)	0.003(6)	0.013(2)	0.010(2)	0.031(6)	-0.001(2)	-0.003(6)	-0.011(4)
C(6)	0.396(2)	-0.020(2)	-0.018(9)	0.014(2)	0.010(2)	0.036(6)	-0.002(1)	-0.004(13)	0.000(9)
C(7)	0.500(2)	-0.048(2)	-0.003(9)	0.014(2)	0.012(2)	0.034(7)	0.002(2)	-0.005(17)	-0.009(9)
C(8)	0.569(2)	0.031(2)	-0.018(5)	0.013(2)	0.012(2)	0.035(7)	0.001(1)	0.001(4)	0.002(5)
C(9)	0.543(2)	0.137(2)	0.026(5)	0.011(2)	0.015(2)	0.035(6)	0.005(2)	0.004(5)	0.002(6)
C(10)	0.250(2)	0.101(2)	0.030(5)	0.012(2)	0.016(2)	0.044(9)	0.002(1)	-0.003(5)	-0.005(5)
O	0.326(1)	-0.096(1)	0.029(4)	0.011(1)	0.011(1)	0.042(5)	-0.001(1)	0.003(3)	0.000(3)

구조에 관한 고찰

결합거리와 결합각을 Table IV 및 Fig. 1에 표시하였다.

벤젠고리내의 C—C 결합거리는 1.36Å^o부터 1.46Å^o 사이의 값을 가지며 그 평균값은 1.40Å^o이며 결합각은 116^o 부터 122^o 사이의 값을 가지며 그 평균값은 119.5^o이다. I 원자의 atomic scattering factor 각 분자내의 다른 원자의 그것에 비하여 대단히 크다는 점을 고려하면 전

Table III—Observed and calculated structure factors. Columns are index, $|F_{obs}|$ and $|F_{cal}|$.

0	0	2	331.01	345.96	1	3	7	26.81	26.54	2	4	1	152.04	144.69	
0	0	4	200.09	207.77	1	4	0	19.15	18.65	2	4	2	21.30	22.45	
0	0	6	106.80	101.37	1	4	1	43.17	40.73	2	4	3	113.28	112.14	
0	0	8	42.69	37.01	1	4	2	53.21	52.98	2	4	5	67.46	66.62	
0	0	10	24.50	14.03	1	4	3	48.71	48.29	2	4	7	35.48	37.39	
0	1	1	47.30	59.92	1	4	4	30.03	29.56	2	5	0	125.36	123.40	
0	1	3	97.61	68.96	1	4	5	22.34	19.90	2	5	1	42.98	43.58	
0	1	5	41.56	38.20	1	5	2	27.97	29.54	2	5	2	119.19	116.11	
0	1	7	23.65	29.57	1	6	0	109.43	113.60	2	5	3	26.00	30.74	
0	2	0	35.94	32.95	1	6	1	96.19	93.61	2	5	4	33.72	31.26	
0	2	2	20.74	22.67	1	6	2	78.83	78.73	2	5	6	44.77	45.39	
0	3	1	92.26	91.36	1	6	3	64.76	62.78	2	5	8	22.34	23.51	
0	3	3	59.97	52.11	1	6	4	57.16	56.86	2	6	0	33.15	33.29	
0	3	5	41.95	40.34	1	6	5	45.52	44.44	2	6	1	54.62	54.36	
0	3	7	19.60	17.90	1	6	6	33.41	33.96	2	6	2	24.31	26.91	
0	4	0	188.83	186.99	1	7	0	63.35	62.23	2	6	3	36.60	33.41	
0	4	2	163.77	165.55	1	7	1	83.90	83.19	2	6	5	29.56	31.65	
0	4	4	101.55	105.04	1	7	2	62.41	63.46	2	8	1	66.16	58.33	
0	4	6	56.97	58.17	1	7	3	70.11	69.87	2	8	3	57.53	57.28	
0	4	8	29.94	27.68	1	7	4	43.45	44.14	2	8	5	29.38	30.01	
0	5	1	102.20	100.74	1	7	5	38.85	39.60	2	9	0	100.80	100.65	
0	5	3	92.91	68.43	1	7	6	23.93	26.72	2	9	2	78.18	78.14	
0	5	5	56.50	55.06	1	7	7	23.09	22.50	2	9	4	56.78	57.51	
0	5	7	31.82	30.72	1	8	0	52.37	49.98	2	9	6	36.23	35.48	
0	6	0	80.71	82.00	1	8	1	52.84	57.11	2	10	1	39.89	40.87	
0	6	2	55.94	54.27	1	8	2	41.48	41.57	2	10	3	40.45	38.64	
0	6	4	41.43	41.98	1	8	3	39.93	45.94	2	10	5	23.16	24.92	
0	6	6	31.44	27.07	1	8	4	29.26	32.59	2	11	0	29.75	30.72	
0	6	8	63.26	62.53	1	8	5	29.00	29.64	2	13	2	26.44	27.33	
0	8	2	72.17	72.67	1	10	0	24.03	22.05	2	14	1	31.44	29.20	
0	8	4	48.33	47.62	1	11	0	39.04	40.47	2	14	3	22.71	24.66	
0	8	6	25.53	24.62	1	11	1	51.05	50.95	3	1	0	91.97	88.96	
0	9	1	82.50	81.38	1	11	2	39.23	39.21	3	1	2	95.73	85.60	
0	9	3	58.66	58.36	1	11	3	45.71	42.92	3	1	4	57.91	56.87	
0	9	5	41.58	44.32	1	11	4	28.25	27.62	3	3	3	58.47	56.27	
0	9	7	24.96	23.99	1	11	5	26.09	25.47	3	3	5	43.17	44.49	
0	10	0	46.71	51.96	1	12	0	34.16	35.65	3	1	5	35.01	34.08	
0	10	2	54.15	53.44	1	12	1	27.97	28.13	3	1	6	28.16	28.46	
0	10	4	36.93	38.76	1	12	2	29.09	29.14	3	2	0	76.86	70.61	
0	13	1	32.66	33.20	1	12	3	19.15	21.36	3	2	1	119.47	115.64	
0	13	3	26.94	27.04	1	15	0	20.46	15.78	3	2	2	33.06	35.32	
0	14	0	26.75	27.79	2	0	0	37.63	35.01	3	2	3	14.97	12.74	
0	14	2	26.23	26.94	2	0	1	281.37	275.56	3	2	4	53.96	52.65	
1	1	1	46.74	49.10	2	0	3	49.74	45.93	3	2	5	59.13	56.60	
1	1	3	31.35	29.54	2	0	4	21.21	23.30	3	2	6	31.18	33.42	
1	1	5	30.22	31.57	2	0	5	113.56	112.64	3	3	0	132.24	129.45	
1	1	2	120.13	125.04	2	0	7	52.18	49.62	3	3	1	132.77	133.59	
1	1	2	115.44	120.46	2	0	9	21.77	20.71	3	3	2	36.05	36.45	
1	1	2	140.31	135.02	2	1	0	96.67	99.39	3	3	3	72.17	65.13	
1	1	2	3	109.24	105.06	2	1	1	50.77	49.26	3	3	4	66.70	59.28
1	1	2	4	87.47	84.65	2	1	2	149.32	134.79	3	3	5	47.49	44.76
1	1	2	5	58.39	56.10	2	1	3	44.77	43.27	3	3	6	39.79	40.46
1	1	2	6	44.11	43.32	2	1	4	80.34	76.61	3	3	8	20.74	17.54
1	1	2	7	30.89	31.12	2	1	6	34.54	37.38	3	4	0	36.13	37.96
1	1	2	8	21.96	23.22	2	1	8	24.87	22.23	3	4	1	23.28	23.17
1	1	3	0	168.74	164.46	2	2	1	50.68	50.73	3	4	2	45.24	46.77
1	1	3	1	122.85	122.38	2	2	5	22.05	23.26	3	4	3	39.32	41.37
1	1	3	2	106.99	108.24	2	3	0	138.81	137.69	3	4	4	24.31	23.91
1	1	3	3	68.51	65.66	2	3	2	93.10	90.59	3	5	1	25.15	23.54
1	1	3	4	73.20	73.61	2	3	4	61.57	60.02	3	5	3	28.27	23.02
1	1	3	5	57.62	55.12	2	3	6	33.79	30.15	3	6	0	86.61	84.49
1	1	3	6	44.77	41.01	2	4	0	22.62	24.40	3	6	1	76.39	75.86

3	6	2	66.92	65.45	4	6	4	31.82	31.72	5	8	4	24.03	26.27
3	6	3	50.12	46.32	4	6	6	22.99	21.94	5	10	0	37.54	35.69
3	6	4	47.30	46.35	4	7	0	19.90	22.20	5	10	2	27.40	27.42
3	6	5	37.73	38.60	4	8	0	44.95	47.25	5	10	4	19.90	18.26
3	6	6	25.43	25.33	4	8	2	54.43	54.38	5	11	0	23.74	22.64
3	7	0	79.40	76.50	4	8	4	35.48	35.73	5	11	1	32.66	32.16
3	7	1	46.17	47.08	4	9	1	77.43	75.75	5	11	2	21.77	22.42
3	7	2	80.99	78.42	4	9	3	56.50	55.73	5	11	3	28.72	30.14
3	7	3	42.14	40.93	4	9	5	41.11	41.08	5	11	4	19.80	16.01
3	7	4	53.12	52.82	4	9	7	20.46	22.02	5	12	0	37.63	32.36
3	7	5	27.03	26.97	4	10	0	33.50	34.91	5	12	2	26.28	26.38
3	7	6	26.81	30.60	4	10	2	35.38	36.57	6	0	0	35.94	38.81
3	8	0	41.48	41.21	4	10	4	26.75	26.23	6	0	1	144.06	145.54
3	8	1	54.53	52.16	4	13	1	23.74	24.78	6	0	3	92.16	94.89
3	8	2	36.23	37.47	4	13	3	19.52	20.53	6	0	5	63.26	64.85
3	8	3	36.88	38.15	4	13	5	20.55	15.54	6	0	7	30.69	29.63
3	8	4	26.28	28.46	4	14	0	25.72	25.06	6	1	0	59.60	59.09
3	8	5	24.03	23.65	4	14	2	24.40	24.14	6	1	1	47.77	42.96
3	8	6	19.80	16.76	4	14	4	20.63	16.20	6	1	2	74.89	73.99
3	10	1	29.66	28.81	5	1	0	39.61	41.43	6	1	3	46.74	47.03
3	10	3	19.90	19.10	5	1	1	57.44	52.03	6	1	4	49.18	47.91
3	11	0	47.58	45.86	5	1	2	34.44	36.13	6	1	5	16.80	17.65
3	11	1	33.50	36.23	5	1	3	33.32	32.21	6	1	6	26.37	28.43
3	11	2	47.58	45.13	5	1	4	26.75	30.04	6	3	0	35.10	34.46
3	11	3	32.75	30.56	5	1	5	28.62	29.16	6	3	1	27.87	29.33
3	11	4	31.53	32.88	5	2	0	77.52	82.94	6	3	2	26.18	24.38
3	11	5	19.61	18.53	5	2	1	106.49	98.79	6	3	4	21.59	22.45
3	12	0	29.94	27.74	5	2	2	100.61	99.73	6	4	0	49.27	48.79
3	12	1	39.04	36.28	5	2	3	73.86	72.46	6	4	1	86.44	84.46
3	12	3	22.15	26.26	5	2	4	70.20	67.65	6	4	2	42.31	43.88
4	0	0	176.88	180.76	5	2	5	42.42	40.29	6	4	3	64.19	65.27
4	0	1	56.31	55.24	5	2	6	33.97	36.18	6	4	4	27.03	25.54
4	0	2	116.91	114.55	5	2	7	22.99	11.40	6	4	5	41.48	42.19
4	0	4	93.19	89.69	5	3	0	73.11	72.61	6	4	7	19.80	23.09
4	0	6	55.37	55.68	5	3	1	110.18	111.04	6	5	0	81.18	84.77
4	0	8	20.83	25.08	5	3	2	59.60	58.22	6	5	2	81.93	81.51
4	1	0	24.12	22.29	5	3	3	61.85	60.73	6	5	4	55.75	57.76
4	1	1	124.45	119.76	5	3	4	42.14	43.48	6	5	6	31.44	33.27
4	1	2	45.52	42.96	5	3	5	51.62	51.96	6	6	1	47.68	45.17
4	1	3	107.55	106.79	5	3	6	22.62	22.64	6	6	3	27.87	23.74
4	1	4	27.97	26.65	5	3	7	27.67	24.81	6	6	5	25.90	21.84
4	1	5	49.74	46.62	5	4	2	34.72	37.01	6	6	1	46.93	46.70
4	1	7	30.31	27.95	5	4	4	19.90	20.94	6	8	3	42.80	41.05
4	2	0	50.30	46.81	5	5	0	21.77	20.86	6	8	5	21.12	21.65
4	2	3	26.94	29.01	5	5	2	24.59	20.62	6	9	0	59.69	58.47
4	2	4	19.24	18.83	5	5	3	25.06	28.64	6	9	2	45.71	46.97
4	3	1	86.25	87.41	5	6	0	65.13	67.06	6	9	4	36.41	36.81
4	3	3	55.37	54.25	5	6	1	47.77	50.47	6	9	6	25.06	23.59
4	3	5	36.13	34.87	5	6	2	48.15	44.26	6	10	1	35.10	33.85
4	4	0	90.65	88.06	5	6	3	40.73	38.19	6	10	3	30.22	28.93
4	4	1	46.64	44.42	5	6	4	35.85	36.67	6	10	5	19.99	17.66
4	4	2	63.72	61.63	5	6	5	23.93	23.03	6	13	2	18.86	18.03
4	4	3	30.69	31.23	5	6	6	22.34	24.81	7	1	0	61.66	64.47
4	4	4	61.38	60.41	5	7	0	23.84	24.65	7	1	2	46.46	47.41
4	4	6	35.76	38.81	5	7	1	71.80	70.09	7	1	4	32.57	35.16
4	5	0	21.02	20.37	5	7	2	23.18	22.40	7	1	6	21.59	21.67
4	5	1	137.59	138.27	5	7	3	60.63	61.12	7	2	0	68.51	68.49
4	5	2	19.05	23.65	5	7	5	34.35	37.02	7	2	1	58.75	59.02
4	5	3	110.27	110.79	5	7	7	23.56	21.46	7	2	2	59.76	57.96
4	5	5	63.26	63.24	5	8	0	45.80	45.10	7	2	3	59.22	59.55
4	5	7	33.50	32.24	5	8	1	33.04	34.84	7	2	4	33.79	35.79
4	6	0	59.13	60.49	5	8	2	39.79	37.65	7	2	5	39.47	32.57
4	6	2	41.95	40.97	5	8	3	27.12	28.01	7	2	6	20.27	21.08

7	2	7	20.74	20.03	8	4	1	32.28	29.79	9	7	1	46.36	43.99
7	3	0	90.10	93.22	8	4	2	54.06	55.56	9	7	3	41.95	36.25
7	3	1	46.93	47.55	8	4	3	23.37	22.15	9	7	5	24.21	22.67
7	3	2	63.16	62.59	8	4	4	38.95	39.17	9	10	0	18.86	16.71
7	3	3	36.96	38.66	8	4	6	20.46	23.14	9	11	3	21.87	17.70
7	3	4	44.39	47.98	8	5	0	20.74	22.74	10	0	0	29.28	28.93
7	3	5	22.05	21.94	8	5	1	48.60	51.47	10	0	1	34.44	33.15
7	3	6	32.47	31.29	8	5	2	25.15	24.39	10	0	2	15.95	15.21
7	4	1	20.27	20.06	8	5	3	39.51	44.43	10	0	3	28.06	30.66
7	4	3	29.00	28.43	8	5	5	24.31	23.32	10	0	5	20.83	22.68
7	6	0	43.45	45.19	8	6	0	25.25	26.38	10	1	0	36.32	38.18
7	6	1	52.26	50.17	8	6	0	25.25	27.31	10	1	2	34.72	33.84
7	6	2	39.70	40.54	8	6	2	27.50	29.21	10	1	4	22.62	23.65
7	6	3	32.85	35.02	8	8	4	20.65	19.46	10	4	0	29.47	29.15
7	6	4	28.25	26.84	8	9	1	43.73	44.64	10	4	1	28.44	29.42
7	6	5	30.78	29.00	8	9	3	32.94	33.71	10	4	2	27.97	25.26
7	7	0	69.45	71.15	8	9	5	21.21	23.27	10	4	3	24.67	24.20
7	7	2	67.20	67.52	8	10	0	23.93	23.27	10	4	4	19.33	15.78
7	7	4	46.08	44.79	8	10	2	23.93	22.91	10	5	0	40.92	39.53
7	7	6	28.72	25.38	8	13	1	21.40	15.58	10	5	2	36.98	36.66
7	10	1	20.65	20.66	9	1	0	22.99	25.27	10	5	4	26.28	25.66
7	11	0	24.78	27.19	9	1	1	32.28	30.34	10	9	0	23.84	26.06
7	11	2	29.00	27.59	9	1	3	21.02	22.83	10	9	2	23.56	22.29
7	11	4	24.21	20.36	9	2	0	63.72	66.03	10	9	4	19.52	17.41
7	12	1	19.99	21.16	9	2	2	63.07	65.69	11	1	0	18.77	24.26
8	0	0	84.00	63.47	9	2	4	40.45	41.63	11	2	1	50.67	50.53
8	0	1	20.65	21.83	9	2	6	20.74	21.52	11	2	3	44.30	41.34
8	0	2	65.32	64.89	9	3	0	36.51	37.23	11	2	5	23.93	23.44
8	0	4	48.80	50.86	9	3	1	46.74	46.08	11	3	0	19.99	21.01
8	0	6	28.62	29.35	9	3	2	33.68	36.70	11	3	3	22.05	15.95
8	1	0	24.78	25.46	9	3	3	29.19	32.10	11	6	1	23.93	21.96
8	1	1	51.99	53.38	9	3	4	26.75	26.79	11	7	0	21.87	21.55
8	1	2	34.35	37.51	9	3	5	26.28	28.31	12	4	0	21.30	21.38
8	1	3	45.33	46.66	9	6	0	31.63	31.33	12	4	1	20.27	16.03
8	1	4	24.31	21.86	9	6	2	22.90	23.55	12	4	2	19.90	19.04
8	1	5	26.09	27.35	9	6	4	18.77	20.61	13	2	0	24.31	22.52
8	4	0	63.26	63.90	9	7	0	20.18	20.57	13	2	2	25.43	21.82

Table IV—Bond distances (Å) and angles (°) with e. s. d.'s in parentheses.

Bond distances(Å)		Bond distances(Å)	
C (1)—N	1.52(3)	C (6)—C (7)	1.43(6)
C (2)—N	1.47(3)	C (7)—C (8)	1.36(5)
C (3)—N	1.54(4)	C (8)—C (9)	1.42(4)
C (4)—N	1.50(3)	C (9)—C (4)	1.38(4)
C (4)—C (5)	1.46(4)	C (5)—C (10)	1.54(4)
C (5)—C (6)	1.41(5)	C (6)—O	1.37(4)
Bond angles(°)		Bond angles(°)	
C (1)—N—C (2)	119(2)	C (4)—C (5)—C (10)	129(3)
C (1)—N—C (3)	93(2)	C (5)—C (6)—C (7)	121(4)
C (1)—N—N(4)	103(2)	C (6)—C (7)—C (8)	119(4)
C (2)—N—C (4)	121(2)	C (7)—C (8)—C (9)	120(3)
C (2)—N—C (3)	116(2)	C (8)—C (9)—C (4)	119(2)
C (3)—N—C (4)	101(2)	C (9)—C (4)—C (5)	122(2)
N—C (4)—C (5)	117(2)	C (6)—C (5)—C (10)	115(3)
N—C (4)—C (9)	121(3)	C (5)—C (6)—O	115(3)
C (4)—C (5)—C (6)	116(3)	C (7)—C (6)—O	118(3)
I O	3.35Å	I C (3)	4.47Å
I C (1)	4.19	I C (10)	4.14
I C (2)	4.23	I C (1)	3.84

기한 결합거리와 작은 무리가 없으며 또 벤젠고리가 정육각형으로부터 찌그러짐은 α -phényl- α -éthyl acétat⁷ α -phényl ammonium⁵ 및 Salicylaldehyde-4-morpholino-thiosemicarbazone⁶ 등에서도 볼 수 있다. 벤젠고리의 least-squares plane을 Table V에 표시한다. C(6)—O 및 C(5)—C(10) 결합 거리는 각각 1.37\AA 및 1.54\AA 이다. 이 결합거리는 다른 화합물⁷에서 상당하는 결합거리와 잘 일치한다. ammonium group에서의 N-C 결합거리의 평균치는 1.51\AA 이고 이 값은 관련화합물^{8,9}에서의 값과 잘 일치한다. I 원자와 —N(CH₃) group 과 사이에서 C..... I

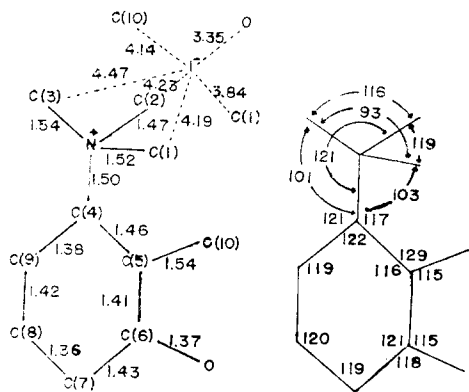


Fig. 1—Bond distances (\AA) and angles ($^\circ$) with atomic numbering of 2-methyl-3-(N-trimethyl ammonium)phenol iodide.

Table V—Least-squares plane in 2-methyl-3-(N-trimethyl ammonium)phenol iodide. Equation for the plane: $Ax+By+Cz=D$, where x, y, z are in \AA .

Atoms in plane	Atoms out of plane	Distance in \AA from best plane	Constant
Benzene ring			
C (1)		0.01	$A = -0.01$
C (2)		-0.02	$B = -0.10$
C (3)		-0.03	$C = 1.00$
C (4)		0.10	$D = -0.12$
C (5)		-0.12	
C (6)		0.06	
	N	-0.06	
	O	0.41	
	C (10)	0.17	

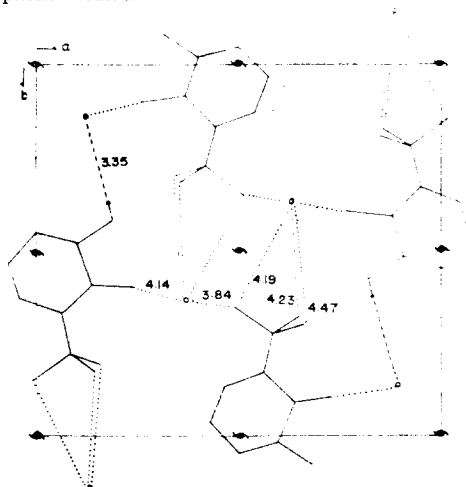


Fig. 2—The crystal structure of 2-methyl-3-N-(trimethyl ammonium)phenol iodide viewed down the c axis. Dotted lines are interatomic distances(\AA). Dashed lines are hydrogen bonds; arrows indicate donor directions.

거리가 C와 I의 van der Waals 반경의 합보다 긴 3.84\AA 부터 4.47\AA 을 갖는다¹⁰⁾. O원자와 I원자 사이에는 3.35\AA 의 수소결합이 존재한다. O원자 및 I원자의 van der Waals 반경은 각각 1.40\AA 및 2.15\AA 이다¹¹⁾. 이와같이 하여 분자와 분자 사이에는 van der Waals force 만으로 접촉되어 있다. C—축에 따라 투영한 2-methyl-3-(N-trimethyl ammonium) phenol Iodide의 결정구조를 Fig. 2에 도시하였다.

문 헌

1. A. J. C. Wilson, *Nature (Lond.)*, 150(1942).
2. D. J. W. Cruickshank, *Computing Methods and the Phase Problem in X-ray Crystal Structure Analysis*, p. 45, New York, Pergamon Press 1961.
3. International Union of Crystallography, *International Table for X-ray Crystallography IV*, Birmingham, The Kynoch Press, 1974.
4. R. Shiono, *Crystallographic Computing Program for IBM1130 System*, Technical Report No. 49, Dept. of Crystallography, Univ. of Pittsburgh, 1971.
5. Marie-Claire Brianso, *Acta Crst.*, **B34**, 679(1978).
6. C. H. Koo, and C. T. Ahn, *J. Korean Chem. Soc.*, **21**, 3(1976).
7. J. F. Griffin, P. D. Strong and W. L. Duax, *Acta, Cryst.*, **B36**, 201(1980).
8. R. C. Elder and Frederick Pera, *Acta Cryst.*, **B34**, 268(1978).
9. P. C. Christidis and P. J. Rentzeperis, *Acta Cryst.*, **B34**, 2143(1978).
10. Gerald R. Freeman and Charles E. Bugg, *Acta Cryst.*, **B30**, 431(1974).
11. L. Pauling, *The Nature of the Chemical Bond*, p. 261, 1960.