

# ОСОБЕННОСТИ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ ИНДОЛИНОВОГО СПИРОПИРАНА С КАТИОННЫМ ЗАМЕСТИТЕЛЕМ

© 2022 г. А. Д. Пугачев<sup>a,\*</sup>, В. В. Ткачев<sup>b,c</sup>, А. С. Козленко<sup>a</sup>, И. В. Ожогин<sup>a</sup>,  
М. Б. Лукьянова<sup>a</sup>, В. С. Дмитриев<sup>a</sup>, С. М. Алдошин<sup>b</sup>, Б. С. Лукьянов<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Научно-исследовательский институт физической и органической химии Южного федерального университета,  
пр. Стачки 194/2, Ростов-на-Дону, 344090 Россия

<sup>b</sup> Институт проблем химической физики Российской академии наук, Черноголовка, 142432 Россия

<sup>c</sup> Институт физиологически активных веществ Российской академии наук, Черноголовка, 142432 Россия

\*e-mail: artem\_d\_pugachev@mail.ru

Поступило в редакцию 15 апреля 2022 г.

После доработки 14 мая 2022 г.

Принято к печати 19 мая 2022 г.

Изучены особенности кристаллической структуры 2-{2-(6'-бром-1,3,3-триметил-спиро[индолин-2,2'-хромен]-8'-ил)этилен}-1,3,3-триметил-3*H*-индолийперхлората. Кристаллы выращивали в разных температурных условиях и в разных смесях растворителей. Межмолекулярные взаимодействия и полости в кристаллах исследованы с применением программного пакета CrystalExplorer v21.5.

**Ключевые слова:** спиропиран, рентгеноструктурный анализ, индолин, 2*H*-хромен

**DOI:** 10.31857/S0044460X22080042, **EDN:** IODUSD

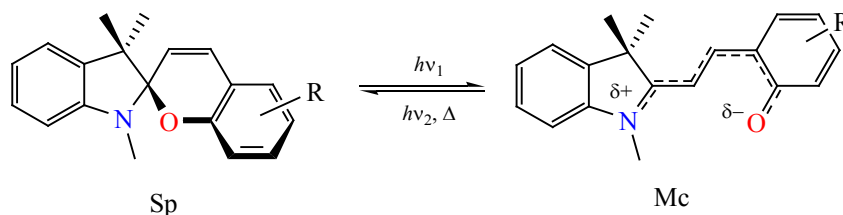
Спиропираны – один классов органических фотохромных соединений [1], которые могут использоваться в составе гибридных материалов [2], а также в качестве легко настраиваемых молекулярных переключателей [3], изменяющих свойства не только при облучении ультрафиолетовым или видимым светом, но и при механическом воздействии [4].

Проявление фотохромизма в тонких пленках [5], в кристаллическом состоянии [6] и в полимерных материалах [7] имеет существенное значение для создания устройств молекулярной электроники, а также устройств записи и хранения информации [8]. Фотохромные превращения спиропиранов, связанные с разрывом связи C<sub>спиро</sub>-O и последующей изомеризацией молекулы из циклического изомера (Sp) в мероцианиновый (Mc) (схема 1), требуют достаточного свободного пространства

[9, 10] и в кристаллах затруднены в силу плотной упаковки молекул в решетке. Как правило, спиропираны в твердой фазе в условиях стационарного облучения не проявляют фотохромизма, обусловленного образованием открытых мероцианиновых структур.

В солях, образованных спироциклическими катионами и объемистыми анионами, рыхлая упаковка кристаллической решетки не создает стерических затруднений для фотоизомеризации фрагмента спиропирана в соответствующую мероцианиновую форму [10]. Катионные производные спиропиранов можно инкорпорировать в солевые структуры, кристаллы которых предоставляют больше пространства для успешного протекания фотоизомеризации в твердой фазе с участием протонированных. Включение сложного металло-оксалатного аниона позволило создать перспективные

Схема 1.



магниты с фотоуправляемыми характеристиками – молекулярные фотомангнетики [11].

Известен случай проявления фотохромизма в кристаллическом состоянии при комнатной температуре у нейтрального спиро[индолин-2,2'-хромена] с метилпропионатной группой при атоме азота [12]. Рыхлая упаковка и большое количество пустот вблизи фотохромных центров обусловлены преобладанием нековалентных межмолекулярных взаимодействий с метилпропионатным заместителем вдали от спироатома углерода. Для спиропиранов характерен полиморфизм, и их свойства в кристаллическом состоянии могут значительно отличаться в зависимости от упаковки молекул в кристалле [13].

Нами исследованы особенности упаковки молекул в кристаллах производных спиро(индолин-2,2'-хромена) с винил-3Н-индолиевым заместителем и атомом брома в хроеновой части молекулы. Молекулярная структура соединения **1** установлена по результатам РСА кристаллов, выращенных при медленном испарении растворите-

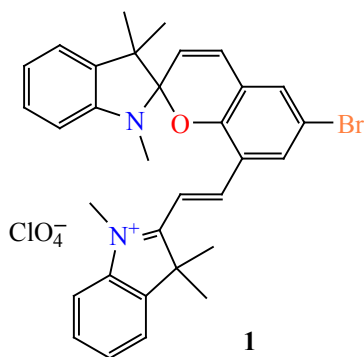
ля (ацетонитрил–этанол, 1:1) при комнатной температуре [14, 15], и депонирована в базу данных CCDC под номером 1919932 (кристалл **A**). Однако подробного изучения особенностей кристаллического строения соединения **1** (схема 2) не проводилось.

Мы попытались стабилизировать соединение в мероцианиновой форме, изменяя условия выращивания кристалла. Раствор соединения **1** в смеси этанола и ацетонитрила в соотношении 4:1 кипятили 1 ч с 2-молярным избытком хлорида цинка, затем выращивали кристаллы (кристалл **B**), испаряя растворитель в сушильном шкафу при 323 К. При исследовании кристалла **B** соединения **1** методом РСА установлено, что молекулярная структура (рис. 1) соединения аналогична ранее опубликованной, но кристаллическое строение несколько отличается (табл. 1).

В кристалле **B** взаимодействие между пирановым атомом кислорода и атомом водорода винильного фрагмента более выражено. Длина внутримолекулярной водородной связи составляет 2.094 Å, величина угла DHA 126.54° (против 2.111 Å в кристалле **A**, угол DHA 125.12°). Углы между плоскостями хроенового и индолинового фрагментов почти одинаковы: 81.48 (A) и 81.41° (B).

С целью изучения особенностей кристаллического строения были построены поверхности Хиршфельда и исследованы полости в кристаллах. Для солевых спироциклических структур такие исследования проведены впервые. Ранее нами были изучены кристаллы нейтральных спиросоединений индолинового ряда [16, 17]. Поверхность Хиршфельда (рис. 2), построенная по нормализованному контактному расстоянию  $d_{\text{ном}}$ , показывает вовлеченные в межмолекулярные взаимо-

Схема 2.



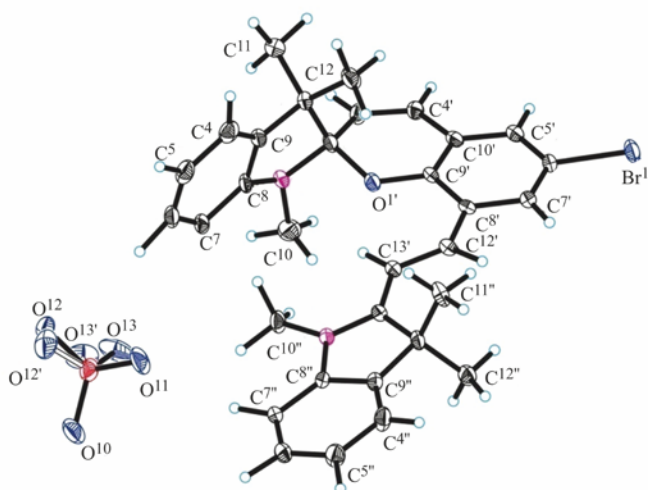
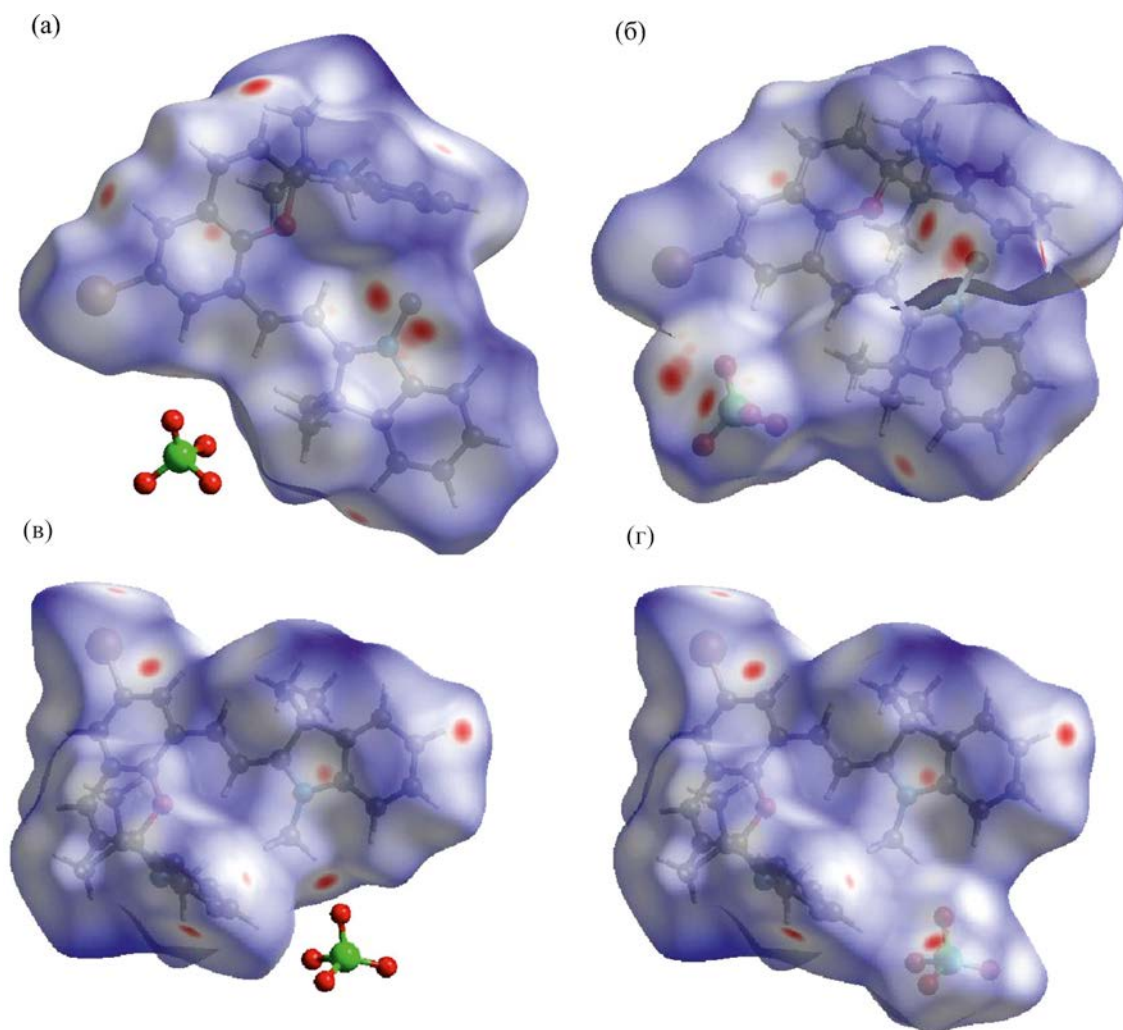


Рис. 1. Общий вид молекулы соединения 1 (кристалл Б).

Таблица 1. Кристаллографические данные для кристаллов А и Б соединения 1

Параметр	Кристалл А	Кристалл Б
Брутто-формула	$C_{32}H_{32}BrClN_2O_5$	$C_{32}H_{32}BrClN_2O_5$
Цвет кристалла	Оранжевый	Красный
$M$		639.95
CCDC	1919932	2165813
Сингония		Моноклиная
Пространственная группа		$P2_1/n$
Параметры элементарной ячейки		
$a$ , Å	12.6425(5)	12.5885(6)
$b$ , Å	13.8634(9)	13.8631(10)
$c$ , Å	16.8021(9)	16.8350(9)
$\beta$ , град	96.870(5)	96.936(5)
Объем ячейки ( $V$ ), Å <sup>3</sup>	2923.7(3)	2916.5(3)
$Z$	4	4
$d_{\text{выч}}$ , г/см <sup>3</sup>	1.454	1.455
$F(000)$	1320	1316
$m$	1.542	1.545
Размеры кристалла, мм	0.32×0.30×0.30	0.46×0.27×0.21
Диапазон $\theta$ , град	2.84 < $\theta$ < 31.6	2.93 < $\theta$ < 31.51
Измеренные отражения	12690	12317
Независимые отражения	5734	5693
Отражения с $F > 4\sigma(F)$	4678	3711
Диапазон индексов	-15 < $h$ < 15; -17 < $k$ < 12; -20 < $l$ < 13	-15 < $h$ < 15; -17 < $k$ < 10; -19 < $l$ < 20
Количество уточненных параметров	390	389
GoF	1.032	1.010
$R_{\text{int}}$	0.0248	0.0578
$wR_2$	0.0821	0.1707
$R_1$ с $I > 2\sigma(I)$	0.0360	0.0636

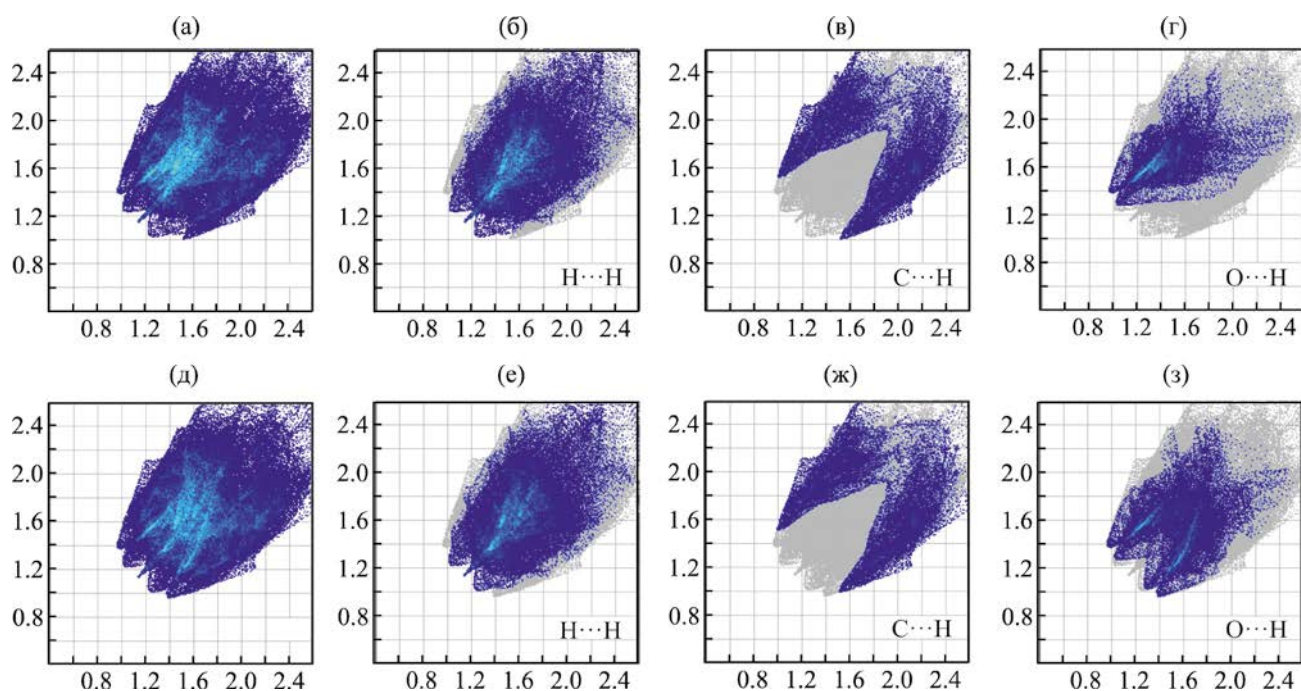


**Рис. 2.** Поверхность Хиршфельда, построенная по нормализованному контактному расстоянию  $d_{\text{norm}}$  для кристалла **A** без учета аниона (в диапазоне от  $-0.1935$  до  $1.6924$  а. е.) (а) и с учетом аниона (в диапазоне от  $-0.1926$  до  $1.7119$  а. е.) (б), для кристалла **B** без учета аниона (в диапазоне от  $-0.1521$  до  $1.6940$  а. е.) (в) и с учетом аниона (в диапазоне от  $-0.1374$  до  $1.6997$  а. е.) (г).

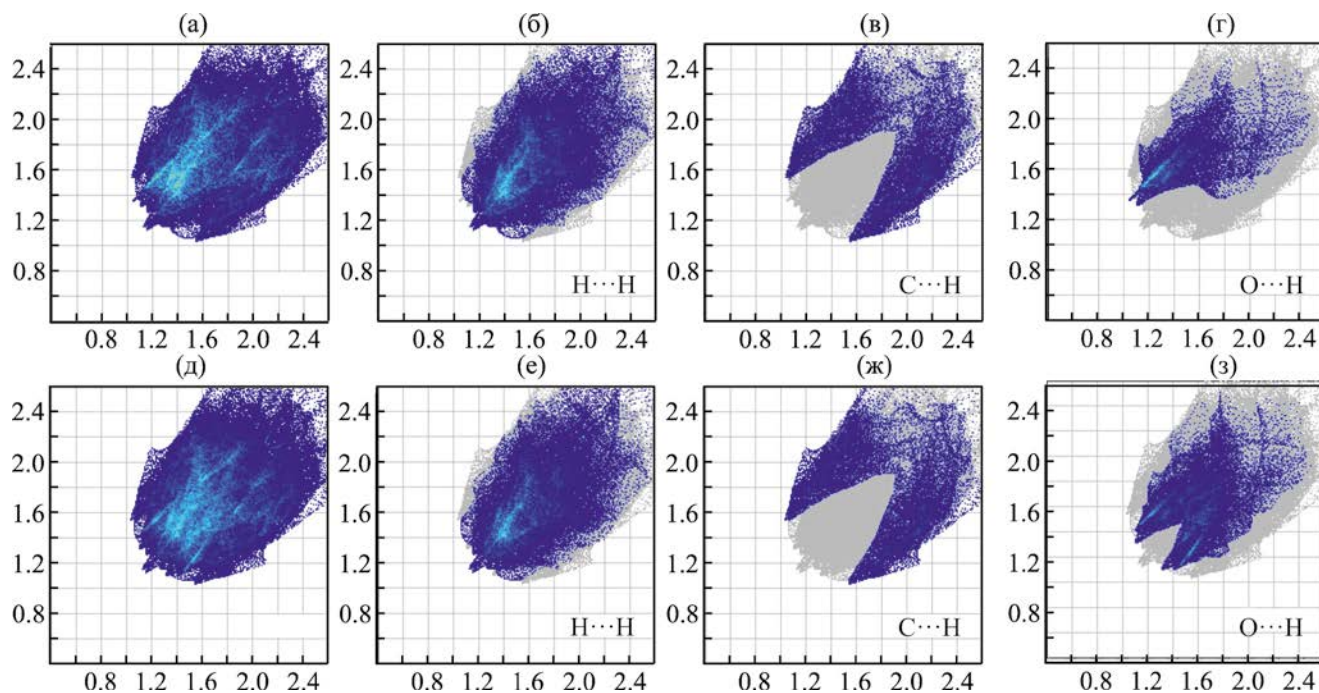
действия области (обозначены красным) [18]. Для кристалла **A** на поверхности без учета аниона насчитывается 14 таких областей, а с учетом аниона – 18. В кристалле **B** на поверхности Хиршфельда обнаружено 16 (без учета аниона) и 22 (с учетом аниона) области.

По полученным поверхностям Хиршфельда были построены и проанализированы поверхности отпечатков пальцев (рис. 3 и 4, табл. 2). Анализ поверхностей отпечатков пальцев показал, что

в кристалле преобладают взаимодействия  $\text{H}\cdots\text{H}$  (42.9–48.5%). Следовательно, в кристалле преобладают слабые ван-дер-ваальсовы взаимодействия [12]. Взаимодействия  $\text{C}\cdots\text{N}$  в кристаллах вызваны неклассическими межмолекулярными водородными связями, а контакты  $\text{O}\cdots\text{N}$  – взаимодействием положительно заряженной молекулы спиросоединения с перхлорат-анионом. Контакты  $\text{Br}\cdots\text{H}$  и  $\text{Br}\cdots\text{C}$  свидетельствуют об образовании галогенных связей в кристалле.



**Рис. 3.** Поверхность отпечатков пальцев межмолекулярных взаимодействии в кристалле **A** соединения **1**. (а) – все межмолекулярные взаимодействия без учета аниона; (б) – взаимодействия  $\text{H}\cdots\text{H}$  без учета аниона; (в) – взаимодействия  $\text{C}\cdots\text{H}$  без учета аниона; (г) – взаимодействия  $\text{O}\cdots\text{H}$  без учета аниона; (д) – все межмолекулярные взаимодействия с учетом аниона; (е) – взаимодействия  $\text{H}\cdots\text{H}$  с учетом аниона; (ж) – взаимодействия  $\text{C}\cdots\text{H}$  с учетом аниона; (з) – взаимодействия  $\text{O}\cdots\text{H}$  с учетом аниона.



**Рис. 4.** Поверхность отпечатков пальцев межмолекулярных взаимодействии в кристалле **B** соединения **1**. (а) – все межмолекулярные взаимодействия без учета аниона; (б) – взаимодействия  $\text{H}\cdots\text{H}$  без учета аниона; (в) – взаимодействия  $\text{C}\cdots\text{H}$  без учета аниона; (г) – взаимодействия  $\text{O}\cdots\text{H}$  без учета аниона; (д) – все межмолекулярные взаимодействия с учетом аниона; (е) – взаимодействия  $\text{H}\cdots\text{H}$  с учетом аниона; (ж) – взаимодействия  $\text{C}\cdots\text{H}$  с учетом аниона; (з) – взаимодействия  $\text{O}\cdots\text{H}$  с учетом аниона.

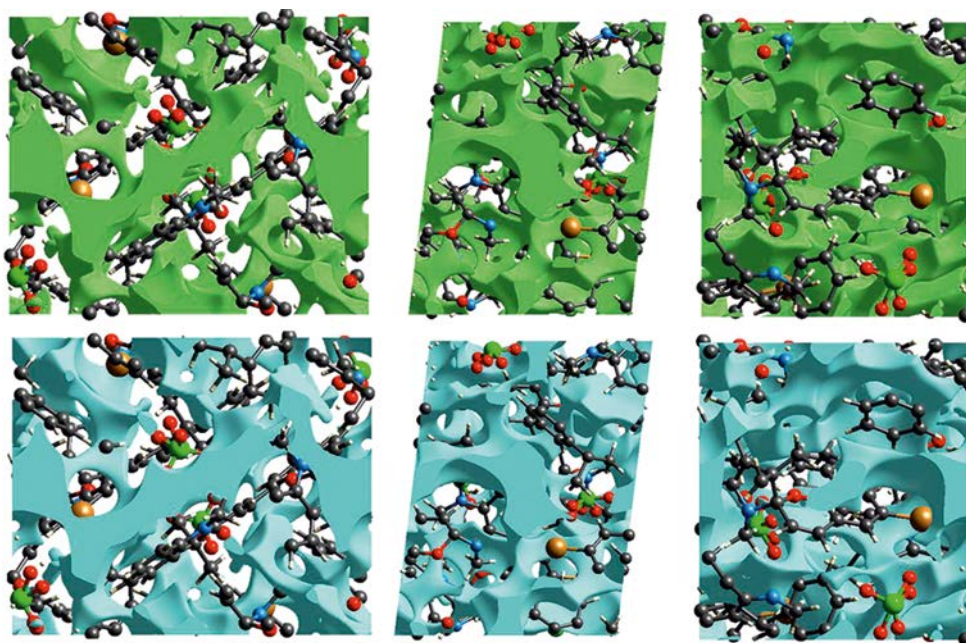


Рис. 5. Пустоты в элементарной ячейке кристаллов **A** (сверху) и **B** (снизу) в трех проекциях.

В кристалле **B** обнаружено 20 укороченных контактов, а в кристалле **A** – всего 8 (табл. 3). Контакт  $\text{Br}^{1'} \cdots \text{C}^7$  можно рассматривать как слабую межмолекулярную галогенную связь, в которую вовлечены в качестве донора атом углерода  $\text{C}^7$   $\pi$ -системы индолинового фрагмента и атом брома соседней молекулы. В кристалле **B** длина такой связи равна 3.455 Å (угол  $\text{C}^1\text{BrC}^7$  133.18°), а в кристалле **A** – 3.461 Å ( $\text{C}^6\text{BrC}^7$  134.48°).

Укороченные контакты  $\text{C} \cdots \text{H}$  относятся к слабым межмолекулярным водородным связям (табл. 2), в которых акцептор – атом углерода  $\pi$ -системы. Углы межмолекулярных связей  $\text{C}^{10}\text{H}^5\text{C}^5$  и  $\text{C}^{10}\text{H}^{21}\text{C}^5$  – 133.57 и 138.32° соответственно. В кристалле **B** атомы водорода  $\text{H}^{21}$  и  $\text{H}^{32}$  образуют слабые межмолекулярные водородные связи сразу с несколькими атомами углерода  $\pi$ -системы.

Таблица 2. Соотношение укороченных контактов между разными химическими элементами в кристаллах **A** и **B** соединения **1**

Контакт	Кристалл <b>A</b>		Кристалл <b>B</b>	
	без учета аниона, %	с учетом аниона, %	без учета аниона, %	с учетом аниона, %
$\text{H} \cdots \text{H}$	48.5	44.1	47.3	42.9
$\text{C} \cdots \text{H}$	19.7	18.0	20.0	17.9
$\text{O} \cdots \text{H}$	16.1	22.6	15.5	22.6
$\text{Br} \cdots \text{H}$	9.5	8.7	8.1	7.3
$\text{Br} \cdots \text{C}$	2.8	2.5	4.5	4.1
$\text{C} \cdots \text{O}$	1.0	1.7	1.8	2.1
$\text{N} \cdots \text{H}$	1.2	1.1	1.3	1.2
$\text{N} \cdots \text{O}$	0.3	0.5	0.4	0.7
$\text{C} \cdots \text{C}$	0.6	0.5	0.7	0.7
$\text{Br} \cdots \text{O}$	0.3	0.4	0.5	0.5

**Таблица 3.** Сравнение укороченных контактов в кристаллах **A** и **B** соединения **1**

Кристалл <b>A</b>		Кристалл <b>B</b>	
Контакт	<i>d</i> , Å	Контакт	<i>d</i> , Å
Br <sup>1'</sup> ...C <sup>7</sup>	3.461	Br <sup>1'</sup> ...C <sup>7</sup>	3.455
C <sup>10'</sup> ...H <sup>5</sup>	2.796	C <sup>10'</sup> ...H <sup>21</sup>	2.706
C <sup>7'</sup> ...H <sup>5''</sup>	2.701	C <sup>7'</sup> ...H <sup>16</sup>	2.599
C <sup>5</sup> ...H <sup>4''</sup>	2.734	C <sup>5</sup> ...H <sup>32</sup>	2.642
C <sup>13'</sup> ...O <sup>2</sup>	3.196	C <sup>13'</sup> ...O <sup>10</sup>	3.162

Распределение пустот в кристаллах приведено в трех проекциях (рис. 5). По характеру расположения полостей кристаллы практически не различаются, однако есть небольшая разница в количественной оценке. В кристалле **B**, выращенном при более высокой температуре, суммарный объем пустот в кристаллической ячейке немного выше: 334.31 Å<sup>3</sup> (11.43%) в кристалле **A** и 349.01 Å<sup>3</sup> (11.97%) в кристалле **B**.

Детальное изучение кристаллического строения 2-{2-(6'-бром-1,3,3-триметилспиро[индолин-2,2'-хромен]-8'-ил)этенил}-1,3,3-триметил-3*H*-индолийперхлората показало, что выращивание кристаллов в разных условиях не оказало существенного влияния на структуру молекулы, а добавление в раствор избытка хлорида цинка не привело к образованию Zn-органического комплекса. Формирование кристаллов при 323 К привело к увеличению числа укороченных контактов, а также к сокращению межатомных расстояний в аналогичных взаимодействиях, суммарный объем пустот в кристалле увеличился, что, вероятно, вызвано увеличением расстояния между слоями молекул.

#### ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

Параметры элементарной ячейки кристалла и трехмерный набор интенсивностей получены на автодифрактометре Xcalibur, Eos (MoK<sub>α</sub>-излучение, графитовый монохроматор). Проведен эмпирический учет поглощения по процедуре Multiscan. Структура расшифрована прямым методом и уточнена полноматричным методом наименьших квадратов (МНК) по F<sup>2</sup> (программа SHELXTL) в анизотропном приближении для не водородных атомов. В кристаллической структуре большинство атомов Н локализованы в синтезе Фурье разностной электронной плотности, далее

координаты и изотропные тепловые параметры всех атомов Н вычисляли методом МНК по модели *наездника* [19]. Кристаллографические данные для кристалла **B** соединения **1** депонирован в Кембриджский банк кристаллоструктурных данных под номером CCDC 2165813.

Поверхности Хиршфельда вычисляли методом DFT-B3LYP с использованием базиса 6-311G(d, p) в программе Crystal Explorer v21.5 [20]. Визуализацию и анализ кристалла проводили с использованием программного пакета Mercury [21].

#### ИНФОРМАЦИЯ ОБ АВТОРАХ

Пугачев Артем Дмитриевич, ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-8624-027X>

Козленко Анастасия Сергеевна, ORCID: <https://orcid.org/0000-0003-2495-619X>

Ожогин Илья Вячеславович, ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-9546-7513>

Лукьянова Мария Борисовна, ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-5977-8293>

Дмитриев Виталий Сергеевич, ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-5519-4418>

Алдошин Сергей Михайлович, ORCID: <https://orcid.org/0000-0003-3555-7442>

Лукьянов Борис Сергеевич, ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-9965-0828>

#### ФИНАНСОВАЯ ПОДДЕРЖКА

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 20-03-00214 А) и Президента РФ (грант № МК-4645.2021.1.3). Рентгеноструктурное исследование выполнено в соответствии с государственным заданием (государственная регистра-

ция № АААА-А19-119092390076-7, В.В. Ткачев, С.М. Алдошин).

### КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Bouas-Laurent H., Dürr H. // *Pure Appl. Chem.* 2001. Vol. 73. N 4. P. 639. doi 10.1351/pac200173040639
2. Klajn R. // *Chem. Soc. Rev.* 2014. Vol. 43. N 1. P. 148. doi 10.1039/C3CS60181A
3. Feringa B.L. // *Angew. Chem. Int. Ed.* 2017. Vol. 56. N 37. P. 11060. doi 10.1002/anie.201702979
4. Пугачев А.Д., Муханов Е.Л., Ожогин И.В., Козленко А.С., Метелица А.В., Лукьянов Б.С. // *ХГС.* 2021. Т. 57. № 2. С. 122; Pugachev A.D., Mukhanov E.L., Ozhogin I.V., Kozlenko A.S., Metelitsa A.V., Lukyanov B.S. // *Chem. Heterocycl. Compd.* 2021. Vol. 57. N 2. P. 122. doi 10.1007/s10593-021-02881-y
5. Leinem M.B., Klein P., Sebastian F.L., Zorn N.F., Adamczyk S., Scherf U., Zaumseil J. // *Adv. Electron. Mater.* 2020. Vol. 6. N 11. P. 2000717. doi 10.1002/aelm.202000717
6. Masahiro I., Tsyoshi F., Kenji M., Seiya K. // *Chem. Rev.* 2014. Vol. 114. N 24. P. 12174. doi 10.1021/cr500249
7. Zhang X., Zhou Q., Liu H., Liu Hewen. // *Soft Matter.* 2014. Vol. 10. N 21. P. 3748. doi 10.1039/C4SM00218K
8. Frolova L.A., Rezvanova A.A., Lukyanov B.S., Sanina N.A., Troshina P.A., Aldoshin S.M. // *J. Mater. Chem. C.* 2015. Vol. 3. N 44. P. 11675. doi 10.1039/C5TC02100F
9. Sekine A. // *J. Photochem. Photobiol. (C).* 2021. Vol. 51. P. 100480. doi 10.1016/j.jphotochemrev.2021.100480
10. Funasako Y., Ason M., Takebayashi J., Inokuchi M. // *Cryst. Growth Des.* 2019. Vol. 19. N 12. P. 7308. doi 10.1021/acs.cgd.9b01185
11. Aldoshin S.M., Sanina N.A., Minkin V.I., Voloshin N.A., Ikorskii V.N., Ovcharenko V.I., Smirnov V.A., Nagayeva N.K. // *J. Mol. Struct.* 2007. Vol. 826. N 2–3. P. 69. doi 10.1016/j.molstruc.2006.04.008
12. Wu Z., Wang Q., Li P., Fang B., Yin M. // *J. Mater. Chem. C.* 2021. Vol. 9. P. 6290. doi 10.1039/D1TC00974E
13. Seiler V.S., Tumanov N., Robeyns K., Wouters J., Champagne B., Leyssens T. // *Crystals.* 2017. Vol. 7. N 3. P. 84. doi 10.3390/cryst7030084
14. Пугачев А.Д., Лукьянова М.Б., Ткачев В.В., Лукьянов Б.С., Макарова Н.И., Шилов Г.В., Ростовцева И.А., Лапшина Л.С., Минкин В.И., Алдошин С.М. // Докл. АН. 2019. Т. 484. № 6. С. 698; Pugachev A.D., Lukyanova M.B., Tkachev V.V., Lukyanov B.S., Makarova N.I., Shilov G.V., Rostovtseva I.A., Lapshina L.S., Minkin V.I., Aldoshin S.M. // *Doklady Chem.* 2019. Vol. 484. N 2. P. 58. doi 10.1134/S0012500819020113
15. Pugachev A.D., Ozhogin I.V., Lukyanova M.B., Lukyanov B.S., Rostovtseva I.A., Dorogan I.V., Makarova N.I., Tkachev V.V., Metelitsa A.V., Aldoshin S.M. // *Spectrochim. Acta A. Mol. Biomol. Spectrosc.* 2020. Vol. 230. P. 118041. doi 10.1016/j.saa.2020.118041
16. Пугачев А.Д., Ткачев В.В., Ожогин И.В., Лукьянова М.Б., Алдошин С.М., Минкин В.И., Муханов Е.Л., Метелица А.В., Станкевич Н.В., Лукьянов Б.С. // *Изв. Ан. Сер. хим.* 2021. Т. 11. С. 2090; Pugachev A.D., Tkachev V.V., Ozhogin I.V., Lukyanova M.B., Aldoshin S.M., Minkin V.I., Mukhanov E.L., Metelitsa A.V., Stankevich N.V., Lukyanov B.S. // *Russ. Chem. Bull.* 2021. Vol. 70. N 11. P. 2090. doi 10.1007/s11172-021-3320-2
17. Пугачев А.Д., Ткачев В.В., Алдошин С.М., Макарова Н.И., Ростовцева И.А., Метелица А.В., Станкевич Н.В., Шилов Г.В., Лукьянов Б.С. // *ЖОХ.* 2021. Вып. 91. С. 1027; Pugachev A.D., Tkachev V.V., Aldoshin S.M., Makarova N.I., Rostovtseva I.A., Metelitsa A.V., Stankevich N.V., Shilov G.V., Lukyanov B.S. // *Russ. J. Gen. Chem.* 2021. Vol. 91. N 7. P. 1297. doi 10.1134/S1070363221070069
18. Spackman M.A., Jayatilaka D. // *CrystEngComm.* 2009. Vol. 11. N 1. P. 19. doi 10.1039/B818330A
19. Sheldrick G.M., SHELXTL v. 6.14, Structure Determination Software Suite, Bruker AXS, Madison, Wisconsin, USA, 2000.
20. Spackman P.R., Turner M.J., McKinnon J.J., Wolff S.K., Grimwood D.J., Jayatilaka D., Spackman M.A. // *J. Appl. Crystallogr.* 2021. Vol. 54. N 3. P. 1006. doi 10.1107/S1600576721002910
21. Macrae C.F., Sovago I., Cottrell S.J., Galek P.T.A., McCabe P., Pidcock E., Platings M., Shields G.P., Stevens J.S., Towler M., Wood P.A. // *J. Appl. Cryst.* 2020. Vol. 53. N 1. P. 226. doi 10.1107/S1600576719014092



## Features of Crystallization of Indoline Spiropyran with Cationic Substituent

A. D. Pugachev<sup>a,\*</sup>, V. V. Tkachev<sup>b,c</sup>, A. S. Kozlenko<sup>a</sup>, I. V. Ozhogin<sup>a</sup>, M. B. Lukyanova<sup>a</sup>,  
V. S. Dmitriev<sup>a</sup>, S. M. Aldoshin<sup>b</sup>, and B. S. Lukyanov<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Institute of Physical and Organic Chemistry, Southern Federal University, Rostov-on-Don, 344090 Russia

<sup>b</sup> Institute of Problems of Chemical Physics of the Russian Academy of Sciences, Chernogolovka, 142432 Russia

<sup>c</sup> Institute of Physiologically Active Substances of the Russian Academy of Sciences, Chernogolovka, 142432 Russia

\*e-mail: artem\_d\_pugachev@mail.ru

Received April 15, 2022; revised May 14, 2022; accepted May 19, 2022

Features of the crystal structure of spiropyran with a vinyl-3*H*-indolium substituent and a bromine atom in the 2*H*-chromene moiety of the molecule was investigated. The studied crystals were grown under different temperature conditions and solvent mixtures. Intermolecular interactions and cavities in crystals were studied using the CrystalExplorer v21.5 software package.

**Keywords:** spiropyran, single crystal X-ray diffraction analysis, indoline, 2*H*-chromene, CrystalExplorer